

THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR EN PHYSIQUE NUCLEAIRE 3^e CYCLE

par

Stanislas WILK

SUJET

Production de rayons X_K consécutifs au bombardement
de protons sur les éléments moyens

Soutenue le 15 Juin 1973 devant la Commission d'Examen

JURY

MM. J.C. PEBAY-PEYROULA Président

J.P. LONGQUEUE
G. DECONNINCK Examineurs

1973

THESE

PRÉSENTÉE

À L'UNIVERSITÉ SCIENTIFIQUE ET MÉDICALE DE GRENOBLE

Pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR EN PHYSIQUE NUCLÉAIRE 3^e CYCLE

par

Stanislas VILLIARD

Digitized by the Internet Archive
in 2026

sur

Production de rayons X , consécutifs au bombardement
de protons sur les éléments moyens

Présentée et soutenue

Devant le jury composé de :

M. VIVY

M. LE FÉRAY-FÉMOULAS, Président

M. LONGRUEUX
M. DECORVIGNY

M. LAFONT

THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR EN PHYSIQUE NUCLEAIRE 3^e CYCLE

par

Stanislas WILK

SUJET

**Production de rayons X_K consécutifs au bombardement
de protons sur les éléments moyens**

Soutenue le 15 Juin 1973 devant la Commission d'Examen

JURY

MM. J.C. PEBAY-PEYROULA Président

J.P. LONGEQUEUE
G. DECONNINCK Examineurs

Président : Monsieur Michel SOUTIF
Vice-Président : Monsieur Gabriel CAU

PROFESSEURS TITULAIRES

MM. ANGLES D'AURIAC Paul
ARNAUD Georges
ARNAUD Paul
AUBERT Guy
AYANT Yves
Mme BARBIER Marie-Jeanne
MM. BARBIER Jean-Claude
BARBIER Reynold
BARJON Robert
BARNOUD Fernand
BARRA Jean-René
BARRIE Joseph
BENOIT Jean
BERNARD Alain
BESSON Jean
BEZES Henri
BLAMBERT Maurice
BOLLIET Louis
BONNET Georges
BONNET Jean-Louis
BONNET-EYMARD Joseph
BONNIER Etienne
BOUCHERLE André
BOUCHEZ Robert
BOUSSARD Jean-Claude
BRAVARD Yves
BRISSENEAU Pierre
BUYLE-BODIN Maurice
CABANAC Jean
CABANEL Guy
CALAS François
CARRAZ Gilbert
CAU Gabriel
CAUQUIS Georges
CHABAUTY Claude
CHARACHON Robert
CHATEAU Robert
CHENE Marcel
COEUR André
CONTAMIN Robert
COUDERC Pierre
CRAYA Antoine
Mme DEBELMAS Anne-Marie
MM. DEBELMAS Jacques
DEGRANGE Charles
DESRE Pierre
DESSAUX Georges
DODU Jacques
DOLIQUE Jean-Michel
DREYFUS Bernard
DUCROS Pierre
DUGOIS Pierre
FAU René
FELICI Noël

Mécanique des fluides
Clinique des maladies infectieuses
Chimie
Physique
Physique approfondie
Electrochimie
Physique expérimentale
Géologie appliquée
Physique nucléaire
Biosynthèse de la cellulose
Statistiques
Clinique chirurgicale
Radioélectricité
Mathématiques Pures
Electrochimie
Chirurgie générale
Mathématiques Pures
Informatique (IUT B)
Electrotechnique
Clinique ophtalmologique
Pathologie médicale
Electrochimie Electrometallurgie
Chimie et Toxicologie
Physique nucléaire
Mathématiques Appliquées
Géographie
Physique du Solide
Electronique
Pathologie chirurgicale
Clinique rhumatologique et hydrologie
Anatomie
Biologie animale et pharmacodynamie
Médecine légale et Toxicologie
Chimie organique
Mathématiques Pures
Oto-Rhino-Laryngologie
Thérapeutique
Chimie papetière
Pharmacie chimique
Clinique gynécologique
Anatomie Pathologique
Mécanique
Matière médicale
Géologie générale
Zoologie
Métallurgie
Physiologie animale
Mécanique appliquée
Physique des plasmas
Thermodynamique
Cristallographie
Clinique de Dermatologie et Syphillographie
Clinique neuro-psychiatrique
Electrostatique

MM.	GAGNAIRE Didier	Chimie physique
	GALLISSOT François	Mathématiques Pures
	GALVANI Octave	Mathématiques Pures
	GASTINEL Noël	Analyse numérique
	GEINDRE Michel	Electroradiologie
	GERBER Robert	Mathématiques Pures
	GIRAUD Pierre	Géologie
	KLEIN Joseph	Mathématiques Pures
Mme	KOFLER Lucie	Botanique et Physiologie végétale
MM.	KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques Pures
	KRAVTCHENKO Julien	Mécanique
	KUNTZMANN Jean	Mathématiques Appliquées
	LACAZE Albert	Thermodynamique
	LACHARME Jean	Biologie végétale
	LAJZEROWICZ Joseph	Physique
	LATREILLE René	Chirurgie générale
	LATURAZE Jean	Biochimie pharmaceutique
	LAURENT Pierre	Mathématiques Appliquées
	LEDRU Jean	Clinique médicale B
	LLIBOUTRY Louis	Géophysique
	LOUP Jean	Géographie
Mlle	LUTZ Elisabeth	Mathématiques Pures
	MALGRANGE Bernard	Mathématiques Pures
	MALINAS Yves	Clinique obstétricale
	MARTIN-NOEL Pierre	Seméiologie médicale
	MASSEPORT Jean	Géographie
	MAZARE Yves	Clinique médicale A
	MICHEL Robert	Minéralogie et Pétrographie
	MOURIQUAND Claude	Histologie
	MOUSSA André	Chimie nucléaire
	NEEL Louis	Physique du Solide
	OZENDA Paul	Botanique
	PAUTHENET René	Electrotechnique
	PAYAN Jean-Jacques	Mathématiques Pures
	PEBAY-PEYROULA Jean-Claude	Physique
	PERRET René	Servomécanismes
	PILLET Emile	Physique industrielle
	RASSAT André	Chimie systématique
	RENARD Michel	Thermodynamique
	REULOS René	Physique industrielle
	RINALDI Renaud	Physique
	ROGET Jean	Clinique de pédiatrie et de puériculture
	SANTON Lucien	Mécanique
	SEIGNEURIN Raymond	Microbiologie et Hygiène
	SENGEL Philippe	Zoologie
	SILBERT Robert	Mécanique des fluides
	SOUTIF Michel	Physique générale
	TANCHE Maurice	Physiologie
	TRAYNARD Philippe	Chimie générale
	VAILLAND François	Zoologie
	VALENTIN Jacques	Physique Nucléaire
	VAUQUOIS Bernard	Calcul électronique
Mme	VERAIN Alice	Pharmacie galénique
M.	VERAIN André	Physique
Mme	VEYRET Germaine	Géographie
MM.	VEYRET Paul	Géographie
	VIGNAIS Pierre	Biochimie médicale
	YOCOZ Jean	Physique nucléaire théorique

PROFESSEURS ASSOCIES

MM.	BULLEMER Bernhard	Physique
	HANO JUN-ICHI	Mathématiques Pures
	STEPHENS Michaël	Mathématiques Appliquées

PROFESSEURS SANS CHAIRE

MM.	BEAUDOING André	Pédiatrie
Mme	BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques Pures
MM.	BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques appliquées
	BIAREZ Jean-Pierre	Mécanique
	BONNETAIN Lucien	Chimie minérale
Mme	BONNIER Jane	Chimie générale
MM.	CARLIER Georges	Biologie végétale
	COHEN Joseph	Electrotechnique
	COUMES André	Radioélectricité
	DEPASSEL Roger	Mécanique des Fluides
	DEPORTES Charles	Chimie minérale
	GAUTHIER Yves	Sciences biologiques
	GAVEND Michel	Pharmacologie
	GERMAIN Jean Pierre	Mécanique
	GIDON Paul	Géologie et Minéralogie
	GLENAT René	Chimie organique
	HACQUES Gérard	Calcul numérique
	JANIN Bernard	Géographie
Mme	KAHANE Josette	Physique
MM.	MULLER Jean-Michel	Thérapeutique
	PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et minéralogie
	POULOUJADOFF Michel	Electrotechnique
	REBECQ Jacques	Biologie (CUS)
	REVOL Michel	Urologie
	REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
	ROBERT André	Chimie papetière
	DE ROUGEMONT Jacques	Neurochirurgie
	SARRAZIN Roger	Anatomie et chirurgie
	SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
	SIBILLE Robert	Construction Mécanique
	SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme	SOUTIF Jeanne	Physique générale

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

Mle	AGNIUS-DELORD Claudine	Physique pharmaceutique
	ALARY Josette	Chimie analytique
MM.	AMBLARD Pierre	Dermatologie
	AMBROISE-THOMAS Pierre	Parasitologie
	ARMAND Yves	Chimie
	BEGUIN Claude	Chimie organique
	BELORIZKY Elie	Physique
	BENZAKEN Claude	Mathématiques Appliquées
	BILLET Jean	Géographie
	BLIMAN Samuel	Electronique (EIE)
	BLOCH Daniel	Electrotechnique
Mme	BOUCHE Liane	Mathématiques (CUS)
MM.	BOUCHET Yves	Anatomie
	BOUVARD Maurice	Mécanique des Fluides

MM.	BRODEAU François	Mathématiques (IUT B)
	BRUGEL Lucien	Energétique
	BUISSON Roger	Physique
	BUTEL Jean	Orthopédie
	CHAMBAZ Edmond	Biochimie médicale
	CHAMPETIER Jean	Anatomie et organogénèse
	CHIAVERINA Jean	Biologie appliquée (EFP)
	CHIBON Pierre	Biologie animale
	COHEN-ADDAD Jean-Pierre	Spectrométrie physique
	COLOMB Maurice	Biochimie médicale
	CONTE René	Physique
	COULOMB Max	Radiologie
	CROUZET Guy	Radiologie
	DURAND Francis	Métallurgie
	DUSSAUD René	Mathématiques (CUS)
Mme	ETERRADOSSI Jacqueline	Physiologie
MM.	FAURE Jacques	Médecine légale
	GENSAC Pierre	Botanique
	GIDON Maurice	Géologie
	GRIFFITHS Michaël	Mathématiques Appliquées
	GROULADE Joseph	Biochimie médicale
	HOLLARD Daniel	Hématologie
	HUGONOT Robert	Hygiène et Médecine préventive
	IDELMAN Simon	Physiologie animale
	IVANES Marcel	Electricité
	JALBERT Pierre	Histologie
	JOLY Jean-René	Mathématiques Pures
	JOUBERT Jean-Claude	Physique du Solide
	JULLIEN Pierre	Mathématiques Pures
	KAHANE André	Physique générale
	KUHN Gérard	Physique
	LACOUME Jean-Louis	Physique
Mme	LAJZEROWICZ Jeannine	Physique
MM.	LANCIA Roland	Physique atomique
	LE JENTER Noël	Electronique
	LEROY Philippe	Mathématiques
	LOISEAUX Jean-Marie	Physique Nucléaire
	LONGUEUE Jean-Pierre	Physique Nucléaire
	LUU DUC Cuong	Chimie Organique
	MACHE Régis	Physiologie végétale
	MAGNIN Robert	Hygiène et Médecine préventive
	MARECHAL Jean	Mécanique
	MARTIN-BCUYER Michel	Chimie (CUS)
	MAYNARD Roger	Physique du Solide
	MICHOULIER Jean	Physique (I.U.T. "A")
	MICOUD Max	Maladies infectieuses
	MOREAU René	Hydraulique (INP)
	NEGRE Robert	Mécanique
	PARAMELLE Bernard	Pneumologie
	PECCOUD François	Analyse (IUT B)
	PEFFEN René	Métallurgie
	PELMONT Jean	Physiologie animale
	PERRET Jean	Neurologie
	PERRIN Louis	Pathologie expérimentale
	PFISTER Jean-Claude	Physique du Solide
	PHÉLIP Xavier	Rhumatologie
Mlle	PIERY Yvette	Biologie animale

MM.	RACHAIL Michel	Médecine interne
	RACINET Claude	Gynécologie et obstétrique
	RENAUD Maurice	Chimie
	RICHARD Lucien	Botanique
Mme	RINAUDO Marguerite	Chimie macromoléculaire
MM.	ROMIER Guy	Mathématiques (IUT B)
	SHOM Jean Claude	Chimie Générale
	STIEGLITZ Paul	Anesthésiologie
	STOEBNER Pierre	Anatomie pathologique
	VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques Appliquées
	VEILLON Gérard	Mathématiques Appliquées (INP)
	VIALON Pierre	Géologie
	VOOG Robert	Médecine interne
	VIROUSSOS Constantin	Radiologie
	ZADWORNÝ François	Electronique

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

MM.	BOUDOURIS Georges	Radioélectricité
	CHEEKE John	Thermodynamique
	GOLDSCHMIDT Hubert	Mathématiques
	SIDNEY STUARD	Mathématiques Pures
	YACOUD Mahmoud	Médecine légale

CHARGES DE FONCTIONS DE MAITRES DE CONFERENCES

Mme	BERIEL Hélène	Physiologie
Mme	RENAUDET Jacqueline	Microbiologie

Fait le 30 Mai 1972

A mes Parents,

A ma Femme,

A mon Fils.

TABLE DES MATIERES.

	Pages
AVANT-PROPOS	1
INTRODUCTION	2
CHAPITRE I.	
Modèles relatifs à la production de rayons-X émis par suite du bombardement par des particules lourdes chargées.	4
I. Position Physique du problème	4
II. Modèle quantique (PWBA)	9
1. Rappels sur le processus de collisions	9
2. Approximation de Born	11
3. Choix des fonctions d'ondes	15
3.1 Fonctions d'ondes de l'ion incident	15
3.2 Fonctions d'ondes de l'atome-cible	17
4. Calcul des éléments de matrice $ \langle \psi_f / v / \psi_i \rangle ^2$	18
4.1 Ionisation de la couche K	18
4.2 Excitation de la couche K	22
5. Sections efficaces d'ionisation et d'excitation.	24
5.1 Section efficace d'ionisation	25
5.2 Section efficace d'excitation	26
5.3 Charge effective Z_{eff}	28
5.4 Expression du paramètre θ_K	30
III. Modèle semi-classique (BEA)	30
1. Formulation générale dans le cas classique du choc de deux particules avec un transfert d'énergie ΔE . Expression de $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$	31
2. Expression de $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ et de $\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(v_1, v_2)$ dans le cas coulombien	33
3. Expression de $\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(v_1, v_2)$ dans le cas de chocs par une particule lourde $m_1 > m_2$ avec perte d'énergie de celle-ci. ($\Delta E \gg 0$)	37

4. Terme correctif pour tenir compte de l'interaction coulombienne entre l'ion incident et le noyau de l'atome-cible.	42
---	----

CHAPITRE II.

Méthode expérimentale et résultats des mesures de sections efficaces de production de rayonnement X_K sur les éléments Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni et Cu consécutif au bombardement par des protons d'énergie comprise entre 0.4 et 2.3 MeV.	46
--	----

I. Principes de la mesure.	46
II. Description expérimentale	47
III. Mesure d'excitation	49
1. Choix des cibles.	49
1.1 Epaisseur	49
1.2 Mode de préparation et pureté	50
1.3 Supports	50
2. Distance de détection	51
3. Mesure du poids de la cible	52
4. Mesure d'excitation	53
IV. Mesure absolue	53
V. Dépouillement	57
1. Efficience de la jonction de rétrodiffusion	57
2. Efficience du détecteur de rayonnement-X	57
3. Absorption dans la fenêtre de mylar	58
4. Absorption dû au parcours du rayonnement dans l'air	59
5. Angles solides	60
5.1 Angle solide de rétrodiffusion	60
5.2 Angle solide de détection du rayonnement	61
6. Energie	61
7. Dépouillement	61
7.1 Pic de rétrodiffusion	61
7.2 Rayonnement-X primaire	62
7.3 Rayonnement-X secondaire	62

VI. Résultats	64
CONCLUSIONS	77
APPENDICE	79
FIGURES	91
REFERENCES	93

AVANT PROPOS.

Nous exprimons toute notre reconnaissance à ceux qui nous ont aidés et encouragés au cours de ce travail soit par une aide directe, soit par des conseils.

Nous remercions tout d'abord Monsieur le Professeur J.C. PEBAY-PEYROULA qui a bien voulu présider le Jury ainsi que Monsieur le Professeur G. DECONNINCK des Facultés Universitaires de Louvain et de Namur (Belgique) pour nous avoir intéressé au sujet et mis à notre disposition les possibilités de son laboratoire et dont les conseils, les discussions et l'aide fructueuse nous ont été prodiguées généreusement. Nous remercions également Monsieur le Professeur J.P. LONGEQUEUE qui a bien voulu nous orienter dans ce domaine.

Nous sommes aussi heureux d'exprimer ici notre gratitude au Docteur F. BODART pour avoir guidé nos premiers pas quant aux techniques expérimentales de ce travail ainsi qu'à Monsieur Y. MORCIAUX pour avoir toujours et avec beaucoup d'amabilité et de compétence réglé les problèmes afférents à l'accélérateur.

Enfin, à l'amitié de tous ceux qui furent présents au Laboratoire d'Analyses par Réactions Nucléaires (L.A.R.N.) des Facultés Universitaires de Namur où le présent travail a été effectué.

suivie d'un réarrangement électronique. Du point de vue énergétique, ceci se traduit soit par des transitions non radiatives (Coster-Kronig ou électrons Auger) , soit par transitions radiatives (émission de photons-X).

Nous nous intéressons uniquement à ce dernier phénomène.

Les données expérimentales précises concernant les réactions de production de rayonnement-X par particules lourdes chargées sont relativement rares de sorte que les théoriciens disposent de peu de bases pour améliorer les méthodes de calculs et les modèles utilisables.

Dans cette thèse, nous apportons un ensemble complet de données expérimentales dans une région d'énergie où les diverses prédictions théoriques sont en désaccord.

Nous avons mesuré les sections efficaces de production de rayonnement-X pour une série d'atomes moyens (Ti,V,Cr,Mn,Fe,Co,Ni et Cu) et pour des protons d'énergie variant de 0,5 à 2,3 MeV.

Dans un premier chapitre, nous exposerons les deux modèles théoriques non relativistes disponibles :

- le modèle quantique (PWBA) basé sur l'approximation de BORN et dont la première introduction à ce problème est due à MERZBACHER et LEWIS/ME58/.
- le modèle semi-classique (BEA) basé sur le choc binaire entre la particule incidente et un électron. Ce modèle a été introduit par GARCIA/GA70/.

Quant au second chapitre, nous y décrivons la méthode expérimentale, discuterons du degré de précision et présenterons nos résultats sur les sections efficaces de production de rayonnement X_K .

Enfin, dans nos conclusions, nous comparerons et analyserons les prédictions des deux théories exposées précédemment aux valeurs expérimentales obtenues.

INTRODUCTION

Le récent développement des détecteurs à semi-conducteurs de hautes résolutions (Silicium ou Germanium driftés au Lithium) a permis un regain d'intérêt dans l'étude des rayons X produits par bombardement de particules lourdes chargées.

Dans la pratique, des techniques d'analyse basées sur cette méthode d'activation prompt se sont développées dans de nombreux domaines et particulièrement dans la recherche d'éléments traces qui lorsque le bombardement est effectué à énergie suffisamment basse, ne présente pas de radioactivité résiduelle.

L'avantage des particules lourdes chargées (protons, particules alphas, etc.) par opposition à la fluorescence-X et aux électrons, réside dans la réduction du bruit de fond et du rayonnement de freinage dont la section efficace varie comme l'inverse de la masse au carré de la particule incidente.

L'utilisation en analyse des réactions de production de rayonnement X se heurte cependant à un manque de données expérimentales que nous tentons de combler dans cette thèse.

Le problème de l'analyse est double. D'une part, il faut connaître des courbes d'intensité du rayonnement émis en fonction de l'énergie des particules incidentes. D'autre part, il faut traiter l'information obtenue par des méthodes numériques afin d'obtenir des résultats quantitatifs. Ces calculs nécessitent la connaissance des courbes d'intensité.

L'émission de rayons-X à la suite de bombardement d'atomes par des particules lourdes chargées est consécutive à la désertion d'un ou plusieurs électrons d'une couche électronique profonde par ionisation ou excitation, phénomènes induits par interaction coulombienne entre la particule incidente et les électrons atomiques,

CHAPITRE I.

MODELES RELATIFS A LA PRODUCTION DE RAYONS-X EMIS PAR SUITE DU BOMBARDEMENT PAR DES PARTICULES LOURDES CHARGEES.

I. POSITION PHYSIQUE DU PROBLEME.

Lorsque l'on bombarde à basse énergie (0,5-2,3 MeV) une cible constituée par un ensemble d'atomes d'un élément donné, nous pouvons avoir trois processus principaux :

- la diffusion élastique nucléaire, dont la caractéristique essentielle est l'interaction coulombienne entre la particule incidente et le noyau de l'atome qui se traduit par un changement dans la direction de l'impulsion.
- la réaction atomique dont le mécanisme est la création d'un ou de plusieurs trous dans une couche électronique profonde. Deux phénomènes peuvent suivre :
 - transitions non radiatives : transitions entre les sous-couches d'une même couche (Coster-Kronig) ou émission d'un électron Auger (l'énergie cédée lors de la reconversion est cédée à un électron périphérique).
 - transitions radiatives : émission d'un photon-X souvent appelé rayonnement-X caractéristique.
- les réactions nucléaires : essentiellement les réactions $(p, p'\gamma)$ qui résident dans l'excitation des nucléons du noyau par suite d'excitation coulombienne et dont la manifestation sera l'émission d'un rayonnement γ .

Parmi ces trois réactions, seules les deux premières jouent un rôle important en physique atomique et nous ne nous intéresserons qu'à celles-là.

Lorsque l'on effectue pratiquement une réaction (p,X) sur les éléments moyens, les atomes se trouvent sous forme solide (évaporation d'un élément sur un support) et les états d'énergie sont en fait des bandes d'énergie.

Les différents modèles considèrent l'atome comme libre.

Le temps de vie d'un atome ionisé est relativement long et de l'ordre de 10^{-15} secondes pour la couche-K. L'atome peut donc être considéré comme ayant des niveaux d'énergie hydrogénoïdes et nous verrons quelles corrections il faut introduire pour corriger le modèle.

Les niveaux concernés par l'existence d'un ou de plusieurs trous se classent en premier lieu par l'indication de la couche désertée. Peu importe où échoit l'électron car les énergies de l'atome ne s'en trouvent guère affectées.

Le moment total de l'ensemble des électrons remplissant une couche est nul. Après désertion d'un électron, la couche acquiert un moment angulaire $\vec{j}$. Pour une couche caractérisée par les nombres quantiques (n,l), le moment j peut prendre les valeurs $j=l\pm 1/2$. De sorte que l'on obtient des niveaux que l'on peut noter : $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$..., l'indice marquant la place vacante.

En général, la notation suivante est utilisée :

$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3s_{1/2}$	$3p_{1/2}$	$3p_{3/2}$	...
K	L_1	L_2	L_3	M_1	M_2	M_3	...

Les niveaux avec des n identiques se trouvent situés dans un même voisinage et loin des niveaux avec des n différents, comme nous pouvons le voir sur la formulation de l'énergie d'ionisation relativiste I_R [ME64 et LA72]

$$I_R = I_{NR} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

où α est la constante de structure fine ($\alpha=1/137$) et I_{NR} est l'énergie non relativiste et donnée par :

$$I_{NR} = \frac{Z^2}{2n^2}$$

en unités atomiques. La correction due aux effets relativistes pour des j différents est faible (de l'ordre de 0,8% pour la couche K).

Nous rappelons que les unités atomiques sont :

- masse : m (masse de l'électron)
- longueur : $\frac{\hbar^2}{me^2} = 5.2918 \cdot 10^{-9} \text{ cm}$ (rayon de la première orbite circulaire de Bohr).
- temps : $\frac{\hbar^3}{me^4} = 2.4189 \cdot 10^{-17} \text{ sec}$ (période de révolution de l'électron dans la première orbite circulaire de Bohr).

L'unité d'énergie s'en déduit aisément : $(E) = ML^2 T^{-2}$ et vaut $\frac{me^4}{\hbar^2} = 27.212 \text{ ev}$ (c'est l'énergie potentielle de l'électron dans la première orbite de Bohr).

En examinant la formule de l'énergie d'ionisation relativiste nous voyons que les termes avec des j différents, par exemple L_1 et L_2 se séparent de L_3 et M_1 et M_2 de M_3 et M_4 . Ces paires de niveaux sont appelés réguliers ou relativistes.

La séparation de ces doublets (j identiques mais l différents) est liée à l'interaction des électrons entre eux. Ils sont appelés irréguliers ou de blindage. Le terme correctif à l'énergie hydrogénoïde provient du potentiel créé par les autres électrons dans la région voisine du noyau.

A partir du modèle de THOMAS-FERMI on peut montrer qu'en unités atomiques /LA67/

$$V(r) = \frac{Z}{r} - 1.8 Z^{4/3}$$

l'unité de potentiel $\frac{me^3}{\hbar^2}$ s'obtient directement à partir du lien existant entre le potentiel et l'énergie.

Ne dépendant pas de (n,l) cette correction n'intervient pas sur les intervalles entre niveaux.

Les termes correctifs principaux à l'énergie des niveaux viennent :

- de l'interaction d'un électron avec ses plus proches voisins appartenant à la même couche. Le calcul au moyen de la méthode du champ self-consistant (SCF) conduit à l'introduction d'une charge effective $Z_{eff} < Z$.
- de l'action des électrons des autres couches qui se traduira par une diminution de l'énergie de liaison de l'électron par suite de l'adjonction d'un terme répulsif au potentiel attractif du noyau de charge Z_{eff} . On introduit un paramètre θ_n (variant naturellement avec le numéro atomique Z) comme étant le rapport de l'énergie d'ionisation observée I_{obs} à son expression non relativiste dans laquelle la charge du noyau est remplacée par sa charge effective.

$$I_{obs} = \theta_n \frac{Z_{eff}^2}{n^2}$$

Nous pouvons aussi avoir non pas une seule désertion avec formation d'un trou dans une couche profonde mais deux ou trois trous. L'interaction spin-orbite chez les électrons internes étant très forte, le couplage entre les trous devra être du type $(j-j)$.

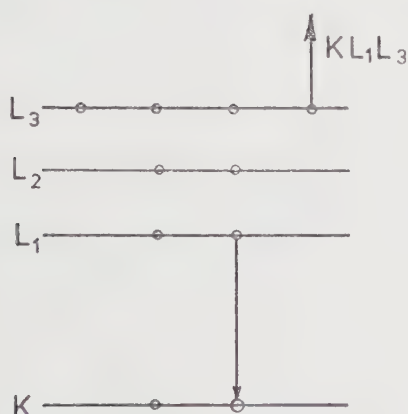
Dans les atomes lourds, le processus prépondérant est la transition du trou de la couche considérée aux couches supérieures avec émission d'un quantum-X. La probabilité des transitions radiatives croît rapidement avec le numéro atomique. En effet, la probabilité par unité de temps ω_{fi} d'émission d'un quantum- X_K en se basant sur l'élément de matrice dipolaire est proportionnelle à $|\langle er \rangle|^2$. Soit en prenant pour l'électron-K des fonctions d'ondes hydrogénoïdes : $\omega_{fi} \approx Z^4$

Pour les atomes légers, le mécanisme prédominant est constitué par les transitions non radiatives : l'énergie libérée lorsqu'un électron supérieur occupe le trou sert à arracher à l'atome un autre électron interne appelé électron Auger.

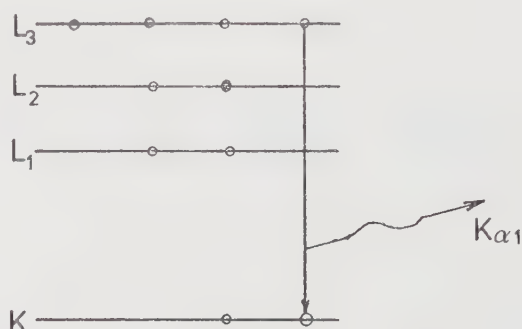
D'autre part, les électrons Auger ont une indépendance en énergie vis-à-vis du faisceau primaire quel qu'il soit, et ceci est aisément compréhensible lorsque l'on considère le mode de production de ces électrons.

Des transitions Auger ont été expliquées à partir du modèle en bandes d'énergie par LANDER ET HANNOVER. /LA53 et HA56/.

Voici résumés dans un schéma ces deux phénomènes



AUGER



RAYONS-X

Cependant, pour un atome donné, les probabilités ω_K d'émission d'un photon-X (appelée aussi rapport de fluorescence) et a_K d'émission d'un électron Auger ne dépendent pas de la manière dont le trou a été effectué dans la couche caractérisée par n et l'on a :

$$\omega_K = \frac{\Gamma_X}{\Gamma_X + \Gamma_A}$$

où Γ_X et Γ_A sont respectivement les largeurs de niveaux-X et Auger de toutes les contributions à chacun de ces deux phénomènes.

En absence de transitions du type Coster-Kronig (comme c'est légitime pour la couche-K) on doit naturellement avoir :

$$\omega_K + a_K = 1$$

si σ_K représente la section efficace de production d'un trou dans la couche K et σ_X la section efficace de production de rayonnement-X nous avons :

$$\sigma_X = N_K \omega_K \sigma_K$$

où N_K est le nombre d'électrons équivalents possédant l'énergie de liaison I_K .

Pour les éléments moyens et pour la couche-K, la largeur Auger Γ_A étant de l'ordre de 1 eV et ω_K de l'ordre de 0,3/BA72/ on en déduit que $\Gamma_X \approx 0.5 \text{ eV}$. Soit en appliquant la relation d'incertitude d'Heisenberg conjuguant l'énergie et le temps, on trouve que $\tau \approx 10^{-15} \text{ sec}$

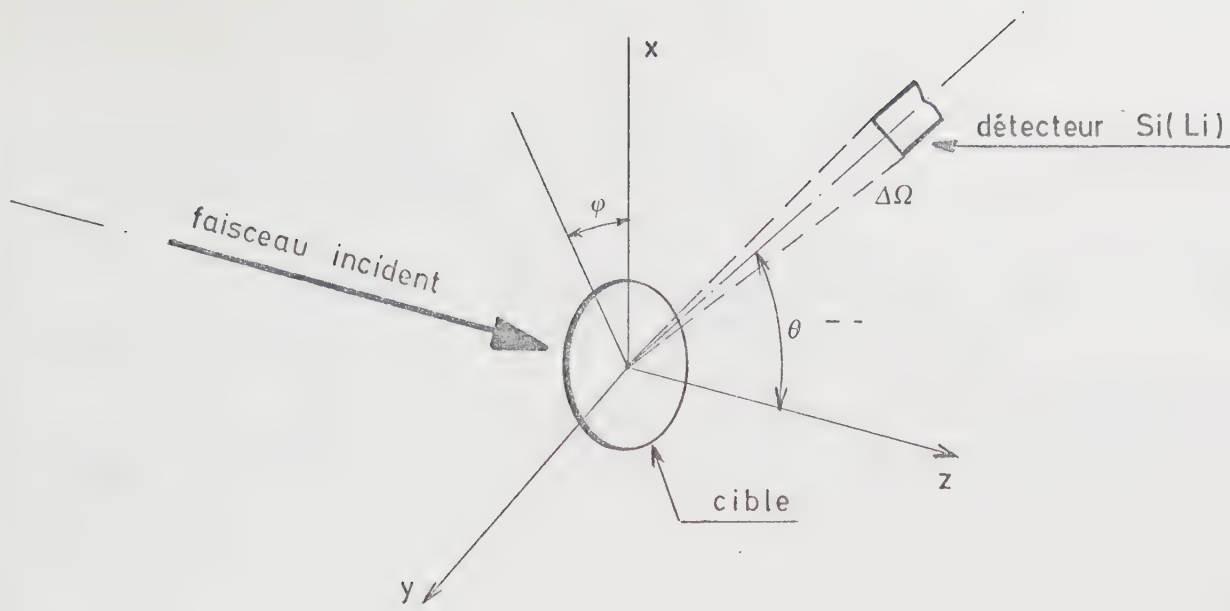
En pratique toutefois, on a l'habitude de ramener ce problème à celui de transitions dans les atomes libres considérés comme hydrogénoïdes.

La partie qui nous reste donc à examiner est la détermination d'une expression théorique pour σ_K .

II. MODELE QUANTIQUE (PWBA).

1. Rappels sur le processus de collisions.

Avant toute recherche d'une expression théorique de la section efficace de production d'un trou dans une couche donnée, il est bon de situer le problème du point de vue expérimental. Le dispositif est résumé dans le schéma suivant :



$\Delta\Omega$ est l'angle sous-tendu par le détecteur.

Nous pouvons faire les hypothèses suivantes :

1) la cible est mince $\Delta E_1 \ll E_1$ où ΔE_1 est l'énergie perdue par la particule incidente d'énergie E_1 dans la cible.

2) la probabilité d'une collision est faible

Le nombre de particules détectées "D" est alors directement proportionnel au nombre "n" d'atomes par unité de surface de la cible.

Nous pouvons donc considérer que chaque atome diffuse indépendamment et c'est pourquoi les modèles théoriques qui seront exposés considèrent l'atome comme libre.

Pour une particule incidente, le nombre de particules "D" détectées sera donné par :

$$D = n \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega$$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ étant un coefficient de proportionnalité appelé section efficace différentielle dépendant à priori des angles ($\theta \varphi$) caractérisant le détecteur ainsi que l'énergie des particules incidentes.

2. Approximation de Born.

Nous emploierons essentiellement le formalisme de la méthode de Green introduite par LIPPMANN et SCHWINGER /LI50/.

Tout système physique peut être décrit par un vecteur de l'espace de Hilbert $|\psi\rangle$. Il est solution de l'équation de Schrödinger.

$$(E - H) |\psi\rangle = 0$$

E et H étant l'énergie et l'hamiltonien total du système.

Soit H_0 l'hamiltonien tel que $H = H_0 + V$ où V est une perturbation par rapport à H_0 et $|\phi\rangle$ un vecteur solution de

$$(E - H_0) |\phi\rangle = 0$$

En décomposant $|\psi\rangle$ sous la forme $|\psi\rangle = |\phi\rangle + |\chi\rangle$ et en introduisant l'opérateur de Green libre G_0^+ tel que :

$$G_0^+ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}$$

on montre aisément que :

$$|\chi\rangle = G_0^+ V |\psi\rangle$$

et $|\psi\rangle$ sera solution de l'équation intégrale :

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + G_0^+ V |\psi\rangle \quad (2)$$

$|\phi\rangle$ peut par exemple être une onde plane incidente non modifiée et $|\chi\rangle$ l'onde sphérique sortante diffusée.

En représentation $\{\vec{r}\}$ l'équation précédente et l'onde plane s'écriront :

$$\psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + \langle \vec{r} | G_0^+ | \psi \rangle \quad \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

En notant $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ et en introduisant les ensemble complets sur $\vec{q}$ et $\vec{r}$ tels que :

$$\int |\vec{q}\rangle \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \langle \vec{q}| = 1 \quad \int |\vec{r}\rangle d\vec{r} \langle \vec{r}| = 1$$

les conditions de normalisation :

$$\langle \vec{q}' | \vec{q} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{q}' - \vec{q}) \quad \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$$

et en intégrant par la méthode des résidus on montre que :

$$\langle \vec{r} | G_0^+ = - \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int \frac{e^{i\hbar|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \langle \vec{r}' | d\vec{r}'$$

Ce qui nous intéresse en fait est le comportement asymptotique de $\langle \vec{r} | G_0^+$ lorsque $r \rightarrow \infty$ car on observe la diffusion ou la réaction loin du centre diffuseur.

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle \vec{r} | G_0^+ = - \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \langle \vec{k}_f | \quad \vec{k}_f = k \frac{\vec{r}}{r}$$

D'où pour $\psi(\vec{r})$ la forme asymptotique :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}$$

$$f(\theta, \varphi) = - \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \langle \vec{k}_f | \psi \rangle$$

Le flux incident étant donné par $\frac{\hbar k_i}{\mu}$ et le flux diffusé par

$$\frac{\hbar k_f}{\mu} |f(\theta, \varphi)|^2$$

La section efficace étant donnée par le rapport des flux incidents et diffusés :

(3)

soit T l'opérateur tel que $T|\vec{k}_i\rangle = V|\psi\rangle$

En prenant pour $|\psi\rangle$ la forme donnée par (2) et en se souvenant de la définition de l'opérateur T on obtient :

$$T|\vec{k}_i\rangle = (V + V G_0^+ T)|\vec{k}_i\rangle$$

$T = V + G_0^+ V T$ peut donc être représenté par une série infinie dont le premier terme constitue l'approximation de Born. Dans ce cas :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} \left\{ \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \right\}^2 |\langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle|^2$$

Si l'on considère le potentiel coulombien (diffusion élastique nucléaire tel que $|\vec{k}_f| = |\vec{k}_i|$), en introduisant des ensembles complets sur $\{\vec{r}\}$ et sachant que le potentiel coulombien n'est pas local :

$$\langle \vec{r}' | V | \vec{r} \rangle = V(\vec{r}) \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \quad V(\vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

Utilisant la relation :

$$\frac{1}{r} = \int \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{4\pi^2 k^2} d\vec{k} \quad (5)$$

on montre que :

$$\langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle = 4\pi \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2}$$

soit dans le système du centre de masse.

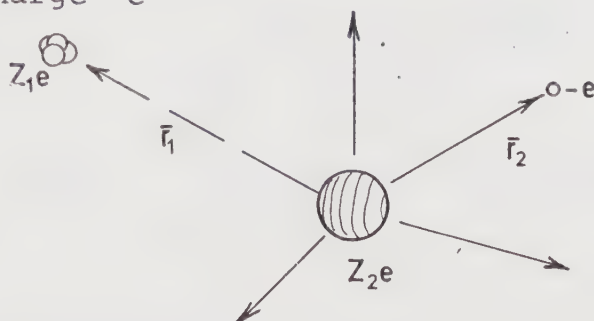
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left\{ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\mu v^2} \right\}^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\psi}{2}}$$

où ψ est l'angle dans le système du centre de masse (SCM) entre $\vec{k}_i$ et $\vec{k}_f$. C'est la formule bien connue de la diffusion Rutherford dont l'expression est identique en mécanique quantique et classique, fait découlant de la non dispersion du paquet d'onde et du théorème d'Ehrenfest.

Dans le cas qui nous préoccupe, production d'un trou dans la couche K le problème est essentiellement à trois corps.

Dans le schéma suivant nous résumons les données du problème:

- ion incident de charge $Z_1 e$
- noyau atomique de charge $Z_2 e$
- électron-K de charge $-e$



L'expression (4) se généralise aisément pour donner, : dans le système du centre de masse particule incidente-atome cible.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} \left\{ \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \right\}^2 \left| \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \right|^2 \quad (7)$$

$\vec{k}_i$ et $\vec{k}_f$ étant respectivement les impulsions initiale et finale de l'ion incident, $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_f\rangle$ les vecteurs d'état décrivant le système (ion incident - atome cible) en absence de la perturbation représentée par V .

En projetant sur $\{\vec{r}\}$ ces vecteurs et en faisant l'hypothèse adiabatique comme il est raisonnable dans notre problème, les fonctions d'ondes $\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et $\psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ peuvent se décomposer respectivement en un produit des fonctions $\varphi_i(\vec{r}_1)$ et $\varphi_f(\vec{r}_1)$ de l'ion incident et $\chi_i(\vec{r}_2)$ et $\chi_f(\vec{r}_2)$ de l'électron-K. (Cette hypothèse ne serait pas justifiée si la particule incidente était un électron de basse ou moyenne énergie où il y aurait des phénomènes d'échange).

Exprimons $\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$ dans notre cas.

Comme précédemment V sera l'interaction coulombienne
mais entre la particule incidente et l'électron-K.

$$\langle \vec{r}_1' \vec{r}_2' | V | \vec{r}_1 \vec{r}_2 \rangle = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_1' - \vec{r}_1) \delta(\vec{r}_2' - \vec{r}_2) \quad V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (8)$$

Dans l'hypothèse adiabatique :

$$\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle = \int \chi_f^*(\vec{r}_2) W(\vec{r}_2) \chi_i(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (9)$$

avec

$$W(\vec{r}_2) = \int \varphi_f^*(\vec{r}_1) V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \varphi_i(\vec{r}_1) d\vec{r}_1$$

3. Choix des fonctions d'ondes.

Nous précisons que toutes les expressions obtenues seront dans le cas non relativiste. Afin de calculer l'élément de matrice $\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$ nous avons besoin de faire un choix judicieux des fonctions d'ondes. Pour cela, examinons une par une les données du problème.

3.1 Fonctions d'onde de l'ion incident.

Dans le calcul de $W(\vec{r}_2)$ intervient le potentiel $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ et les fonctions $\varphi_i(\vec{r}_1)$ $\varphi_f(\vec{r}_1)$

Ces fonctions décrivent le mouvement de l'ion incident dans un champ créé par le noyau et les électrons de l'atome-cible. L'Hamiltonien s'écrit :

$$H_1 = - \frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_1} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_j|}$$

Le troisième terme est négligeable par rapport aux deux premiers et les fonctions propres de cet hamiltonien tronqué sont les fonctions d'ondes coulombiennes qui dans le cas de particules incidentes positives s'écriront :

$$\begin{aligned}
 \varphi_i(\vec{r}_1) &= e^{-\frac{2\pi}{k_i}} \Gamma\left(1 + \frac{i}{k_i}\right) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} F\left(-\frac{i}{k_i}; 1; i(k_i r_1 - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_1)\right) \\
 \varphi_f(\vec{r}_2) &= e^{-\frac{2\pi}{k_f}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{k_f}\right) e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_2} F\left(\frac{i}{k_f}; 1; -i(k_f r_2 + \vec{k}_f \cdot \vec{r}_2)\right)
 \end{aligned} \quad (10)$$

où $F(a; b; x)$ sont les fonctions hypergéométriques confluentes.

Lorsque $k_i \gg 1$ en unités coulombiennes normalisées par rapport à Z_1 et Z_2 , soit en unités usuelles :

$$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_i} \ll 1 \quad (11)$$

Ces fonctions d'ondes se réduisent à des ondes planes et le mouvement de l'ion incident sera rectiligne.

Dans ce cas $W(\vec{r}_1)$ se calcule aisément au moyen de (5) et l'on a :

$$\begin{aligned}
 W(\vec{r}_2) &= -4\pi Z_1 e^2 \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_2}}{q^2} \\
 \vec{q} &= \vec{k}_i - \vec{k}_f
 \end{aligned} \quad (12)$$

Notons que si l'on néglige totalement l'interaction entre l'ion positif incident et le noyau de l'atome et que l'on ne considère le problème que comme étant celui du choc entre la particule incidente et un électron, les fonctions d'ondes $\varphi_i(\vec{r}_1)$ et $\varphi_f(\vec{r}_1)$ seront encore des fonctions d'ondes coulombiennes. Le potentiel d'interaction ne sera plus répulsif mais attractif. On obtient une condition analogue à (11) où $Z_2 = 1$.

$$\frac{Z_1 e^2}{\hbar v_i} \ll 1 \quad (13)$$

C'est la seconde condition de HENNEBERG /ME58/ qui par une analyse en ondes partielles a montré que la description en ondes planes de la particule incidente était alors justifiée.

La première étant que la vitesse de la particule incidente soit plus faible que celle de l'électron considéré. Ceci revient à supposer que l'énergie de liaison I de l'électron n'est pas de beaucoup inférieure au maximum d'énergie transférée lorsque la particule incidente d'énergie E_1 entre en collision avec l'électron au repos :

$$\Delta E_1 = 4 \frac{m_1 m}{(m_1 + m)^2} E_1 \approx I \quad (14)$$

3.2 Fonctions d'ondes de l'atome cible.

L'hamiltonien d'un atome à Z_2 électrons s'écrit :

$$H_2 = \sum_{j=1}^{Z_2} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j - \frac{Z_2 e^2}{r_j} \right\} + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} + (\text{couplage entre spins} \\ + (\text{corrections relativistes, de taille finie, théorie du champ}).$$

Les deux premiers termes explicités conditionnent l'hamiltonien, le reste n'est qu'une perturbation.

Afin d'obtenir une expression générale valable pour tous les éléments, nous ne considérerons que le premier terme en tenant compte du second au moyen de la charge effective Z_{eff} et de la constante θ_K dont nous avons parlé au paragraphe I. Cette expression générale moins exacte que les traitements plus adéquats (Hartree-Fock, Dirac...) a l'avantage d'être plus maniable et moins spécifique d'un élément donné.

Pour l'état initial de l'électron considéré, les fonctions propres sont les fonctions hydrogénoïdes :

$$\chi_i(\vec{r}_2) = \frac{2}{n^{\ell+2} (2\ell+1)!} \sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}} (2r_2)^\ell e^{-\frac{r_2}{n}} F(-n+\ell+1; 2\ell+2; \frac{2r_2}{n}) Y_\ell^m(\theta_2, \varphi_2) \quad (15)$$

L'énergie correspondante $E_n = -\frac{1}{2n^2}$

Pour l'état final, nous pouvons distinguer deux cas :

- a) l'ionisation : éjection de l'électron avec une énergie cinétique $\frac{k^2}{2}$. Les fonctions d'ondes finales seront les fonctions d'ondes coulombiennes (normalisées à l'échelle de k)

$$\chi_f(\vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i\pi}{k}} \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) e^{i\vec{k}\vec{r}_2} F\left(-\frac{i}{k}; 1; -i(kr_2 + \vec{k}\vec{r}_2)\right) \quad (16)$$

- b) l'excitation ; l'électron passe dans une couche supérieure et les fonctions d'ondes finales seront encore du type (15).

4. CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE $|\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2$.

Comme résultat des expressions (9) et (12) dans le cas où la particule incidente est décrite par une onde plane, nous pouvons écrire que :

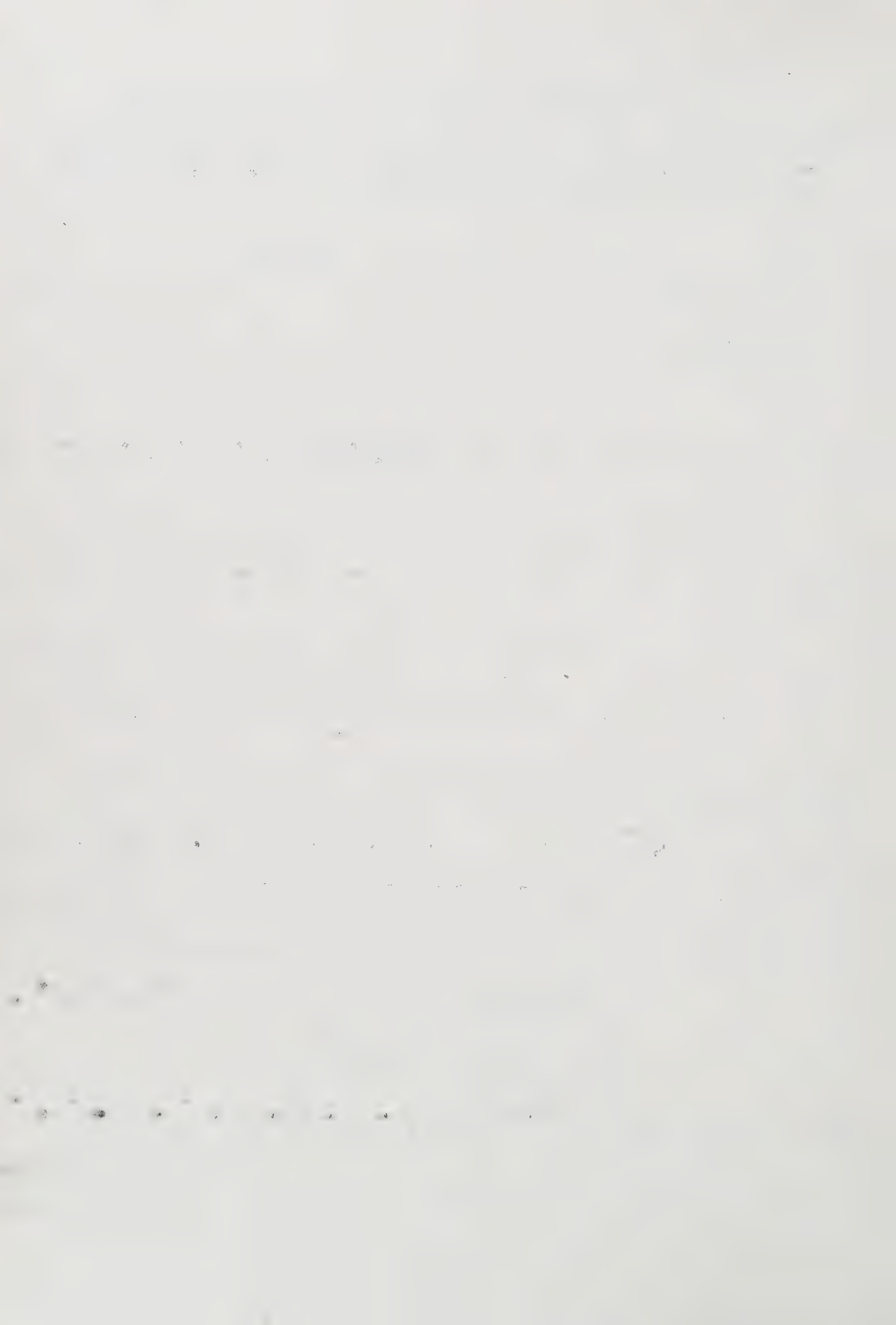
$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle &= -4\pi z_1 e^2 \frac{F(q)}{q^2} \\ \text{avec} \quad F(q) &= \int \chi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \chi_i(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Ce type de calcul mené ici a été effectué la première fois par MOTT et MASSEY /MO65/.

4.1 Ionisation de la couche K

Pour un électron-K l'expression (15) se ramène simplement à :

$$\left. \begin{aligned} \chi_i(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \\ \text{et} \quad F(q) &= \frac{1}{2^{3/2}\pi^2} \Gamma\left(1 - \frac{i}{k}\right) \frac{dI(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=1} \\ \text{avec} \quad I(\lambda) &= - \int e^{i(\vec{q}\vec{r} - \vec{k}\vec{r}) - \lambda r} F\left(\frac{i}{k}; 1; i(kr + \vec{k}\vec{r})\right) d\vec{r} \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

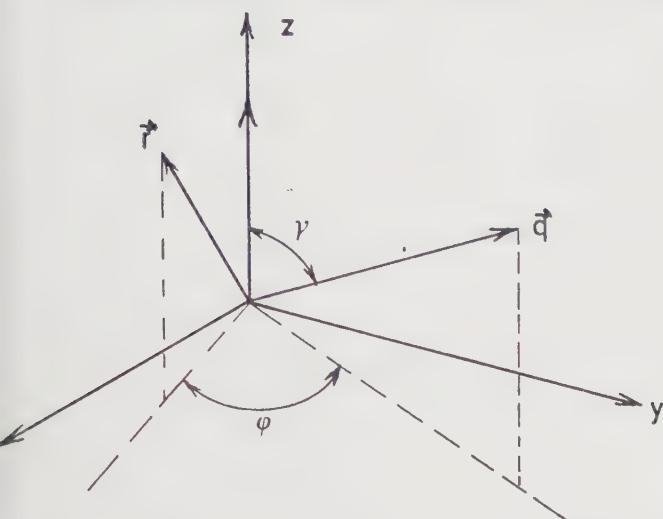


Pour calculer $I(\lambda)$ on exprime $\vec{r}$ en coordonnées paraboliques telles que :

$$\begin{aligned}x &= \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi \\y &= \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi \\z &= \frac{1}{2}(\xi - \eta)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\xi, \eta &\in [0, \infty] \\ \varphi &\in [0, 2\pi]\end{aligned}$$

En choisissant $\vec{k}$ dirigé suivant l'axe des z , φ est l'angle caractérisant $\vec{r}$ par rapport au plan $(\vec{k}, \vec{q})$ et γ l'angle entre $\vec{k}$ et $\vec{q}$



$$\begin{aligned}I(\lambda) &= -\frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-\frac{\xi}{2}} \left[\lambda + i(k - q \cos \gamma) \right] F\left(\frac{i}{k}; 1; i k \xi\right) d\xi \\ &\int_0^\infty d\eta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-g(\eta, \varphi)}\end{aligned}$$

$$g(\eta, \varphi) = \frac{\eta}{2} [\lambda - i(k - q \cos \gamma)] + i q \sqrt{\xi\eta} \sin \gamma \cos \varphi$$

L'intégration sur φ, η se fait au moyen du changement de variables :

$$\begin{aligned}x &= \sqrt{\eta} \cos \varphi \\ y &= \sqrt{\eta} \sin \varphi\end{aligned} \quad x, y \in [-\infty, \infty]$$

$$I(\lambda) = - \int_0^\infty e^{-\frac{\xi}{2}} \left[\lambda + i(k - q \cos \gamma) \right] F\left(\frac{i}{k}; 1; i k \xi\right) d\xi \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{x^2}{2}} [\lambda - i(k - q \cos \gamma)] dx \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{y^2}{2}} [\lambda - i(k - q \cos \gamma) + i y q \sqrt{\xi} \sin \gamma] dy$$

Les intégrales sur x et y sont du type (ou se ramènent à) :

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{x^2}{2}\alpha} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}}$$

et

$$I(\lambda) = -2\pi \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\xi}{2}} \left\{ \frac{q^2 \sin^2 \gamma + \lambda^2 + (k - q \cos \gamma)^2}{\lambda - i(k - q \cos \gamma)} \right\}}{\lambda - i(k - q \cos \gamma)} F\left(\frac{i}{k}; 1; i k \xi\right) d\xi$$

L'intégrale sur ξ est du type :

$$J(x) = \int_0^{\infty} e^{-x\xi} F(a; c; b\xi) d\xi$$

En prenant pour $F(a; c; b\xi)$ la représentation intégrale /LA67/

$$\operatorname{Re}(c-a) > 0 \quad F(a; c; b\xi) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} \oint_c e^{tb\xi} (-t)^{a-1} (1-t)^{c-a-1} dt$$

En permutant l'intégration sur ξ avec celle sur t et, en intégrant sur ξ on obtient :

$$J(x) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} \oint_c (-t)^{a-1} (1-t)^{c-a-1} (x-tb)^{-1} dt$$

D'autre part, pour $\operatorname{Re}(c-a) > 0$ /LA67/

$$F(a, b; c; z) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} \oint_c (-t)^{a-1} (1-t)^{c-a-1} (1-tz)^{-1} dt$$

où $F(a, b; c; z)$ est la fonction hypergéométrique.

$$\int_0^{\infty} e^{-x\xi} F(a; c; b\xi) d\xi = \frac{F(a, 1; c; b/x)}{x}$$

Dans notre cas $c = 1$ $F(a, 1; 1; z) = F(1, a; 1; z) = (1-z)^{-a}$ /AB68/ et :

$$\int_0^{\infty} e^{-x\xi} F(a; c; b\xi) d\xi = x^{a-1} (x-b)^{-a} \quad (19)$$

$$I(\lambda) = -\frac{4\pi}{(\lambda^2 + \alpha)} \left\{ \frac{\lambda^2 + \alpha}{(\lambda - ik)^2 + q^2} \right\}^{\frac{i}{k}}$$

avec

$$\alpha = q^2 + k^2 - 2kq\cos\gamma$$

le calcul de $\left. \frac{dI(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=1}$ se fait aisément au moyen de la dérivée logarithmique. En utilisant :

$$(a+ib)^c = e^{-c \operatorname{arctg} \frac{b}{a}}$$

on obtient :

$$\left. \frac{dI(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=1} = \frac{2^3 \pi}{k} \frac{[k(\alpha - k^2 + q^2) - i(q^2 + k^2 - \alpha)]}{(1 + \alpha)^2 [q^2 + 1 - k^2 - 2ik]} e^{-\frac{1}{k} \operatorname{arctg} \left\{ \frac{2k}{q^2 - k^2 + 1} \right\}} \times$$

$$\times e^{-\frac{i}{k} \ln \left\{ \frac{1 + \alpha}{[(1 + q^2 - k^2)^2 + 4k^2]^{\frac{1}{2}}} \right\}}$$

soit en revenant à (18), l'expression de $F(q)$.

Dans la pratique le calcul de la section efficace fait intervenir $|F(q)|^2$ et :

$$|F(q)|^2 = \frac{2^6}{\pi k (1 - e^{-\frac{2\pi}{k}})} \frac{q^2 [q^2 - 2kq \cos \gamma + (k^2 + 1) \cos^2 \gamma]}{[(q^2 + 1 - k^2)^2 + 4k^2] [1 + q^2 + k^2 - 2kq \cos \gamma]^4} e^{-\frac{2}{k} \operatorname{arctg} \left\{ \frac{2k}{q^2 - k^2 + 1} \right\}} \quad (20)$$

$$\Gamma(z) \Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \quad \left| \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) \right|^2 = \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{k}\right) = \frac{\pi}{k \operatorname{sh} \frac{\pi}{k}}$$

l'expression (20) est pour une direction $\vec{k}$ de l'électron éjecté.
Pour toutes les directions, il faut intégrer l'expression précédente sur toutes les directions de $\vec{k}$. L'intégration azimutale est immédiate.

En posant $x : \cos \gamma$, on est ramené à une intégrale du type :

$$\int_{-1}^1 \frac{ax^2 + bx + (f-a)}{(bx + f)^4} dx = 2 \frac{f - \frac{2}{3}a}{(b^2 - f^2)^2}$$

D'où pour $|F(q)|^2$ l'expression suivante :

$$|F(q)|^2 = \frac{2^8 q^2 \left[q^2 + \frac{1}{3} (k^2 + 1) \right]}{k (1 - e^{-\frac{2\pi}{k}}) [(q^2 + 1 - k^2)^2 + 4k^2]^3} e^{-\frac{2}{k} \operatorname{arctg} \left\{ \frac{2k}{q^2 + 1 - k^2} \right\}} \quad (21)$$

C'est sous cette forme que se trouve donné uniquement le résultat dans l'article de MERZBACHER et LEWIS /ME58/

4.2 Excitation de la couche K

Les calculs effectués ici sont dans le cadre de la même approximation en ondes planes des particules incidentes.

La manière la plus rapide de mener les calculs à bien est d'exprimer les fonctions hydrogéoïdes en coordonnées paraboliques :

$$\chi(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}}{n^2} F_{n_1 m} \left(\frac{\xi}{n} \right) F_{n_2 m} \left(\frac{\eta}{n} \right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (22)$$

avec $F_{pq}(x) = \frac{1}{|q|!} \sqrt{\frac{(p+|q|)!}{p!}} F(-p; |q|+1; x) e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{|q|}{2}}$

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1$$

n fixé $|m| \in [0, n-1]$

$n, |m|$ fixés $n_1 \in [0, n-|m|-1]$

choisissant $\vec{q}$ parallèle à l'axe des z on a pour l'électron-K

$$\chi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi+\eta}{2}}$$

Ne sont pas nuls les éléments de matrices tels que : $m = 0$

$$F(q) = \frac{1}{2n^2} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{\xi}{2}(1+\frac{1}{n}-iq)} e^{-\frac{\eta}{2}(1+\frac{1}{n}+iq)} F(-n_1; 1; \frac{\xi}{n}) F(-n_2; 1; \frac{\eta}{n}) (\xi+\eta) d\xi d\eta$$

Les intégrales du type

$$J(x) = \int_0^{\infty} e^{-xz} z^p F(a; 1; bz) dz$$

se calculent aisément au moyen de (19) et,

$$\int_0^{\infty} e^{-xz} z^p F(a; 1; bz) dz = (-)^p \frac{d^p}{dx^p} [x^{a-1} (x-b)^{-a}] \quad (23)$$

on arrive au résultat :

$$F(q) = \frac{2^4}{h^3} \frac{(1 + \frac{1}{h} + iq)^{-n_2-1} (1 - \frac{1}{h} + iq)^{-n_2} (1 + \frac{1}{h} + iq)^{-n_1-1} (1 - \frac{1}{h} - iq)^{-n_1} [nq - i(n_1 - n_2)]}{[(1 + \frac{1}{h})^2 + q^2][(1 - \frac{1}{h})^2 + q^2]}$$

soit pour $|F(q)|^2$ après quelques transformations :

$$|F(q)|^2 = 2^8 n^6 q^2 \frac{[(n-1)^2 + q^2 h^2]^{n-3}}{[(n+1)^2 + q^2 h^2]^{n+3}} [(n_1 - n_2)^2 + q^2 h^2] \quad (24)$$

D'autrepart, tous les états avec $n_1 + n_2 = n-1$ ont même énergie. En remplaçant n_2 par $n-1-n_1$ et en sommant la fonction de n_1 , on obtient finalement :

$$|F(q)|^2 = 2^8 n^7 q^2 \frac{[(n-1)^2 + q^2 h^2]^{n-3}}{[(n+1)^2 + q^2 h^2]^{n+3}} \left[\frac{n^2-1}{3} + q^2 h^2 \right]$$

(25)

5. SECTIONS EFFICACES D'IONISATION ET D'EXCITATION.

En combinant les équations (7) et (17) on obtient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left\{ \frac{2\mu z_1 e^2}{\hbar^2} \right\}^2 \frac{k_f}{k_i} \frac{|F(q)|^2}{q^4} \quad (26)$$

où μ est la masse réduite de la particule incidente et de l'atome.

Comme $q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \psi$

$$d\Omega = \pi \frac{2q dq}{k_i k_f}$$

Soit en multipliant par 2 l'équation (26) pour tenir compte de la double occupation de la couche K et en considérant un transfert d'énergie de la particule incidente compris entre ε et $\varepsilon + d\varepsilon$

$$d^2\sigma = 8\pi z_1^2 \left(\frac{e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \frac{2q dq}{q^4} |F(q, \varepsilon)|^2 d\varepsilon$$

Comme $|F(q)|^2$ a été calculé en unités coulombiennes, nous aurons en revenant à ces unités

$$d^2\sigma = 8\pi a_0^2 \frac{z_1^2}{z_2^4} \left(\frac{e^2}{\hbar v_1} \right)^2 |F(q, k)|^2 \frac{k}{2} dw$$

en ayant

$$w = k^2 + \frac{1}{n^2} \quad (27)$$

Introduisant la variable η telle que :

$$\eta = \frac{1}{z_2^2} \left(\frac{\hbar v_1}{e^2} \right)^2 = \frac{m}{m_1} \frac{E_1}{z_2^2 R_y} \quad (28)$$

où

$$R_y = \frac{m e^4}{2\hbar^2} = 13,606 \text{ eV}$$

5.1 Section efficace d'ionisation.

soit

$$f(\eta) = \int_{w_{\min}}^{w_{\max}} dw \int_{R_{\min}}^{R_{\max}} \frac{dR}{R^2} |F(R, w)|^2$$

$$R = q^2$$

$$\hbar^2 q_{\max}^2 \approx 2m_1 (\sqrt{E} + \sqrt{E-E_1}) \approx \infty$$

$$R_{\max} = \infty$$

$$\hbar^2 q_{\min}^2 \approx 2m_1 (\sqrt{E} - \sqrt{E-E_1}) = \frac{m_1 E^2}{2E_1}$$

$$R_{\min} = \frac{w^2}{4\eta}$$

$w_{\max} = \infty$ pour des raisons pratiques comme $R_{\max}$

$w_{\min}$ est égal au plus petit transfert d'énergie et donc à l'énergie d'ionisation.

Pour tenir compte de toutes les corrections dont nous avons parlé au paragraphe I quant à l'énergie des niveaux, Z_2 sera à remplacer par la charge effective et l'énergie d'ionisation en unités coulombiennes sera donnée par $\frac{\theta}{h^2}$.

$$\sigma = 8\pi\alpha_0^2 \frac{Z_1^2}{Z_2^4} \frac{f(\eta, \theta)}{\eta} \quad (29)$$

$$f(\eta, \theta) = \int_{\frac{\theta}{h^2}}^{\infty} dw \int_{\frac{w^2}{4\eta}}^{\infty} \frac{dR}{R^2} |F(R, w)|^2$$

les fonctions $f(\eta, \theta)$ s'obtiennent par intégration numérique et ont été tabulées par KHANDELWAL /KA69/ pour l'ionisation des couches K et L.

Nous remarquons que la fonction $\sigma \frac{Z_2^4}{Z_1^2}$ est une "fonction universelle" ne dépendant que du paramètre θ .

Si plusieurs éléments ont la même valeur pour ce paramètre, les sections efficaces de tous ces corps peuvent se déduire de la connaissance de celles d'un seul.

Le passage de l'expression (29) dans le système du laboratoire est immédiate. En effet, l'atome cible est au repos dans ce repère et la relation qui existe entre l'énergie de la particule incidente dans le système du laboratoire et dans le système du centre de masse est donnée par :

$$E_{\text{scM}} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E_{\text{Lab}} \quad (30)$$

d'où

$$\eta_{\text{scM}} = \frac{m}{m_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right)} \frac{E_{\text{Lab}}}{Z_2^2 R_y}$$

Mais comme $m_1 \ll m_2$ (proton sur éléments moyens), en général on a :

$$\eta_{\text{Lab}} \approx \eta_{\text{scM}}$$

5.2 Section efficace d'excitation.

Dans le cas de l'excitation, la fonction $f_n(\eta, \theta)$ se réduit à :

$$f_n(\eta, \theta) = \int_{\frac{\Delta E^2}{4\eta}}^{\infty} \frac{dQ}{Q^2} |F(Q)|^2 \quad (31)$$

avec

$$\Delta E = \theta - \frac{1}{n^2}$$

D'autre part, avec cette expression de $f_n(\eta, \theta)$ nous obtenons la section efficace totale de la transition d'un électron-K vers une couche caractérisée par n . Cependant, en général, la première couche disponible est déjà peuplée d'un certain nombre d'électrons. Aussi nous pondérerons la section efficace pour la couche n par un coefficient C_n qui sera défini comme le rapport entre le nombre de places disponibles et le nombre total $2n^2$ dans la couche. La section efficace totale d'excitation sera donnée par :

$$\sigma = 8\pi a_0^2 \frac{Z_1^2}{Z_2^4} \sum_{n=n_0}^{\infty} \frac{C_n f_n(\eta, \theta)}{\eta} \quad (32)$$

où n_0 est la première couche disponible.

L'expression $f_n(\eta, \theta)$ s'intègre analytiquement. En effet, en posant :

$$\begin{aligned} a &= \left(1 - \frac{1}{n}\right)^2 \\ b &= \left(1 + \frac{1}{n}\right)^2 \\ c &= \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \end{aligned} \quad (33)$$

$$f_n(\eta, \theta) = \frac{2^8}{n^3} \int_{\frac{\Delta F^2}{4\eta}}^{\infty} \frac{dx}{x} (c+x) \frac{(a+x)^{n-3}}{(b+x)^{n+3}}$$

D'autre part, pour $n \geq 3$ en développant $(a+x)^{n-3}$ on obtient :

$$f_n(\eta, \theta) = \frac{2^8}{n^3} \sum_{k=0}^{n-3} C_{n-3}^k a^{n-3-k} \left\{ c \int_{\frac{\Delta F^2}{4\eta}}^{\infty} \frac{x^{k-1} dx}{(b+x)^{n+3}} + \int_{\frac{\Delta F^2}{4\eta}}^{\infty} \frac{x^k dx}{(b+x)^{n+3}} \right\}$$

On montre aisément que l'expression précédente peut se mettre sous la forme :

$$g(x) = \frac{2^8 a^{n-3}}{n^3} \left[c \int_x^{\infty} \frac{dx}{x (b+x)^{n+3}} + \frac{1}{a^{n-3}} \int_x^{\infty} \frac{x^{n-3} dx}{(b+x)^{n+3}} + \sum_{k=0}^{n-4} \left\{ \frac{C_{n-3}^k}{a^k} + \frac{C_{n-3}^{k+1}}{a^{k+1}} \right\} \int_x^{\infty} \frac{x^k dx}{(b+x)^{n+3}} \right] \quad (34)$$

Sachant que /DW57/

$$\int \frac{dx}{x^m (a+bx)^n} = - \frac{1}{a^{m+n-1}} \left[\sum_{s=0}^{m+n-2} \frac{(m+n-2)! (-b)^s}{(m+n-2-s)! s! (m-1-s)!} \left(\frac{a+bx}{x} \right)^{m-s-1} \right]$$

sauf si $m-s-1=0$ auquel cas le terme entre crochets devient :

$$\frac{(m+n-2)!}{(m-1)!(n-1)!} (-b)^{m-1} \ln \left| \frac{a+bx}{x} \right|$$

$$\int \frac{x^n dx}{(a+bx)^n} = \frac{1}{b^{m+1}} \left[\sum_{s=0}^m \frac{m! (-a)^s}{(m-s)! s! (m-n-s+1)!} (a+bx)^{m-n-s+1} \right]$$

sauf si $m-n-s+1=0$ auquel cas le terme entre crochets devient :

$$\frac{m! (-a)^{m-n+1}}{(m-n+1)!(n-1)!} \ln |a+bx|$$

L'expression (34) devient :

$$\begin{aligned}
 g(x) = & \frac{2^8 a^{n-3}}{n^3} \left\{ \frac{c}{b^{n+3}} \left[\ln \left(\frac{b+x}{x} \right) - \sum_{s=1}^{n+2} \frac{(n+2)! (-1)^{s+1}}{(n+2+s)! s! s} \left(1 - \left[\frac{x}{b+x} \right]^s \right) \right] + \right. \\
 & + \frac{1}{a^{n-3}} \sum_{s=0}^{n-3} \frac{(n-3)! (-b)^s}{(n-3-s)! s! (s+5)} \frac{1}{(b+x)^{s+5}} + \sum_{k=0}^{n-4} \frac{(n-3)!}{a^k (n-3+k)!} \times \\
 & \left. \times \left(1 - \frac{n-3-k}{a(k+1)} \right) \sum_{s=0}^k \frac{(-b)^s}{(k-s)! s! (n+2+s-k)} \frac{1}{(b+x)^{n+2+s-k}} \right\}
 \end{aligned}$$

$$f_n(b, \theta) = g \left(\frac{\Delta E^2}{4b} \right)$$

(35)

5.3 Charge effective Zeff.

On introduit après SLATER/SL30/ la notion de charge effective Zeff du noyau pour tenir compte du fait que par suite de la présence d'autres électrons dans la même couche, un électron ne "voit" pas le noyau comme ayant une charge Z mais une charge inférieure $Z_{eff} < Z$.

Pour calculer Zeff on aura recours à la méthode variationnelle du champ self consistant (SCF)

La fonction d'onde $\psi_K(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ correspondant à l'état s des deux électrons-K sera considéré comme le produit des fonctions hydrogénoïdes $\chi_1(\vec{r}_1)$ et $\chi_2(\vec{r}_2)$ de chacun des électrons donnés par (15) pour $n=1$ $l=0$.

Le principe du calcul SCF consiste à minimiser la fonctionnelle ϕ_{12} telle que :

$$\phi_{12} = \iint \psi_K^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H \psi_K(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

avec la condition de normalisation

$$\iint \psi_K^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_K(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 1$$

La variation de Φ_{12} donne l'équation de Schrödinger où l'énergie E s'introduit comme un multiplicateur de Lagrange.

$$\psi_k(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{z_{\text{eff}}^3}{\pi} e^{-z_{\text{eff}}(r_1+r_2)}$$

$$H = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

$$\Phi_{12} = -\int \chi_1^* \Delta_1 \chi_1 d\vec{r}_1 - 2Z \int \chi_1^* \frac{1}{r_1} \chi_1 d\vec{r}_1 + \iint \chi_1^* \chi_2^* \frac{1}{r_{12}} \chi_1 \chi_2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

χ_1 et χ_2 ayant même forme.

Le premier terme se calcule aisément en se souvenant que χ_1 satisfait à :

$$\left(-\frac{\Delta_1}{2} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_1}\right) \chi_1 = -\frac{1}{2} \frac{Z_{\text{eff}}^2}{r_1} \chi_1$$

$$-\int \chi_1^* \Delta_1 \chi_1 d\vec{r}_1 = 2Z_{\text{eff}} \int \chi_1^* \frac{1}{r_1} \chi_1 d\vec{r}_1 - Z_{\text{eff}}^2$$

D'autre part, on peut montrer par simple calcul que :

$$\int \chi_1^* \frac{1}{r_1} \chi_1 d\vec{r}_1 = Z_{\text{eff}}$$

$$\int \chi_1^* \chi_2^* \frac{1}{r_{12}} \chi_1 \chi_2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \frac{5}{8} Z_{\text{eff}}$$

La seconde intégrale se calcule en décomposant $\frac{1}{r_{12}}$ de la manière bien connue :

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_l^l}{r_l^{l+1}} \frac{4\pi}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_l^m(\theta_2, \varphi_2)$$

En intégrant sur les angles et en remplaçant l'unité dans les χ_i par $\sqrt{4\pi} Y_0^0(\theta_i, \varphi_i)$ on doit avoir $l=0, m=0$.

L'intégration sur $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ est classique.

$$\phi_{12} = z_{eff}^2 - 2 z z_{eff} + \frac{5}{8} z_{eff}$$

et sera minimale pour

$$z_{eff} = z - \frac{5}{16} \approx z - 0,3 \quad (36)$$

5.4 Expression du paramètre θ_K

En suivant WALSKE /WA56/, nous adopterons la définition de HÖNL qui a montré que dans le cas de fonctions non relativistes la meilleure valeur pour θ était donnée par

$$\theta = 1 - \frac{I_R - I_{exp}}{I_{NR}} \quad (37)$$

I_R énergie d'ionisation relativiste

I_{NR} énergie d'ionisation non relativiste

I_{exp} énergie d'ionisation expérimentale.

Ces expressions de I_R et I_{NR} sont données au paragraphe I

III. MODELE SEMI-CLASSIQUE (BEA)

Le modèle semi-classique ou "binary encounter model" est essentiellement celui développé par GRYZINSKI /GR65/ modifié par STABLER /ST64/, VRIENS /VR67/ et reformulé de façon plus élégante par GUERJOY /GU66/.

GARCIA /GA70/ a publié un certain nombre d'articles quant à l'application de ce modèle afin de prédire les sections efficaces de production de rayons-X.

Notons que THOMAS/TH69/ a introduit un terme correctif pour tenir compte de l'interaction coulombienne entre la particule incidente et le noyau.

Dans ce qui va suivre, nous exposerons la méthode due à GUERJOY.

1. Formulation générale dans le cas classique du choc de deux particules avec un transfert d'énergie ΔE . Expression de $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$.

Soit dans le laboratoire

- $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ la section efficace de transfert d'énergie ΔE dans la collision de deux particules ayant les vitesses $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$.
- $\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(v_1, v_2)$ la section efficace effectivement moyennée sur toutes les directions de $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$ données

Le modèle semi-classique considère essentiellement l'interaction coulombienne entre la particule incidente de vitesse $\vec{v}_1$ et l'électron atomique de vitesse $\vec{v}_2$ avec un transfert binaire d'énergie ΔE .

Dans le système du laboratoire nous aurons les vitesses $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$ avant et $\vec{v}_1'$ et $\vec{v}_2'$ après la collision alors que dans le système du centre de masse nous aurons respectivement pour les deux situations les vitesses de $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ puis $\vec{u}_1'$ et $\vec{u}_2'$

Nous avons les relations :

$$\begin{aligned} \vec{u}_1 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{v} & \vec{u}_2 &= - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v} & \vec{v} &= \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \\ \vec{u}_1' &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{v}' & \vec{u}_2' &= - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v}' & \vec{v}' &= \vec{v}_1' - \vec{v}_2' \end{aligned}$$

L'hypothèse de base est que la collision ne change pas le module des vitesses mais seulement la direction.

Le transfert d'énergie ΔE dans le laboratoire sera donné

par l'expression classique ($|\vec{v}'| = |\vec{v}|$):

$$\Delta E = \mu \vec{V}_G (\vec{v} - \vec{v}') \quad (38)$$

Nous voyons que ΔE ne dépend que de $\vec{v}$ et $\vec{v}'$, $\vec{V}_G$ la vitesse du centre de masse ne variant pas au cours du choc

En choisissant $\vec{V}_G$ comme axe polaire, on a :

$$\begin{aligned} \Delta E &= \mu V_G v (\cos \theta - \cos \theta') \\ d(\Delta E) &= \mu V_G v \sin \theta' d\theta' \end{aligned} \quad (39)$$

μ est la masse réduite de l'ion incident et de l'électron et ΔE ne dépend que de θ' pour θ donné.

Soit $\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ la section efficace totale dans le système du laboratoire pour $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$ données on a

$$\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = \int \sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) d(\Delta E) \quad (40)$$

D'autre part, si $\bar{\sigma}(\vec{v}, \vec{v}')$ est la section efficace totale dans le système du centre de masse, on a :

$$\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = \int \bar{\sigma}(\vec{v}, \vec{v}') \sin \theta' d\theta' d\varphi' = \frac{1}{\mu V_G v} \int \bar{\sigma}(\vec{v}, \vec{v}') d(\Delta E) d\varphi' \quad (41)$$

soit en comparant (40) et (41) l'expression suivante pour $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$

$$\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = \frac{1}{\mu V_G v} \int \bar{\sigma}(\vec{v}, \vec{v}') d\varphi'$$

(42)

2. Expression de $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ et de $\sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2)$ dans le cas coulombien.

Dans le cas de l'interaction coulombienne entre deux particules nous avons l'expression pour $\bar{\sigma}(\vec{v}, \vec{v}')$ donnée par (6)

$$\bar{\sigma}(\vec{v}, \vec{v}') = \left\{ \frac{z_1 z_2 e^2}{2\mu v^2} \right\}^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\psi}{2}}$$

$$\sin^4 \frac{\psi}{2} = \frac{1}{4} (1 - \cos \psi) \quad \cos \psi = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$$

où (θ, φ) et (θ', φ') sont les directions caractérisant $\vec{v}$ et $\vec{v}'$.

On peut choisir $\varphi = 0$ ce qui ne nuit pas à la généralité car le repère est arbitraire.

L'équation (42) se calcule aisément lorsque l'on sait que :

$$\int_0^{\pi} \frac{d\varphi'}{(a - b \cos \varphi)^2} = \frac{2\pi a}{(a^2 - b^2)^{3/2}} \quad a^2 > b^2$$

et que l'on se souvient de l'expression de ΔE en fonction de θ et θ' donnée par (39).

Nous notons le résultat,

$$\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = 2\pi \frac{(z_1 z_2 e^2)^2 V_G^2}{v^2 |\Delta E|^3} \left(1 - \cos^2 \theta + \frac{\Delta E}{\mu v V_G} \cos \theta \right) \quad (43)$$

La condition $-1 \leq \cos \theta' \leq 1$ avec pour $\cos \theta'$ son expression obtenue à partir de l'équation (39) donne

$$-1 \leq \cos \theta - \frac{\Delta E}{\mu v V_G} \leq 1 \quad (44)$$

Cette relation implique aussi que $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \geq 0$. Si la relation (44) n'est pas satisfaite alors $\sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \equiv 0$.

La seconde hypothèse du modèle est que la seconde particule possède dans le laboratoire une distribution isotrope de vitesse $\vec{v}_2$. On définit la section efficace effectivement moyennée pour tout v_1 connue.

$$v_1 \sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = \frac{1}{4\pi} \int |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) d\Omega_2 \quad (45)$$

Comme la distribution de la vitesse $\vec{v}_2$ est supposée isotrope, la valeur de $\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ ne dépend que du module de $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$ et peut donc être moyennée sur les directions de $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$.

En revenant à la définition de $\vec{v} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$

$$\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(v_1, v_2) = \frac{1}{4\pi v_1} \int v \sigma_{\Delta E}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (46)$$

soit dans le cas coulombien :

$$\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(v_1, v_2) = \frac{(\bar{z}_1 \bar{z}_2 e^2)^2}{8\pi |\Delta E|^3 v_1^3 v_2^2} \int \frac{V_G^2}{v} (1 - \cos^2 \theta + \frac{\Delta E}{\mu v V_G} \cos \theta) d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (47)$$

Cette intégrale se calcule au moyen de l'artifice suivant :

$$\sigma_{\Delta E}^{\text{eff}}(v_1, v_2) = \frac{(\bar{z}_1 \bar{z}_2 e^2)^2}{8\pi |\Delta E|^3 v_1^3 v_2^2} \int d\vec{s}_1 d\vec{s}_2 \delta(\vec{s}_1 - v_1) \delta(\vec{s}_2 - v_2) \frac{V_G^2}{v} (1 - \cos^2 \theta + \frac{\Delta E}{\mu v V_G} \cos \theta)$$

les expressions (47) et (48) étant identiques, les fonctions deltas s'annulant pour :

$$\begin{aligned} \vec{s}_1 &= \vec{v}_1 = \vec{V}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{v} \\ \vec{s}_2 &= \vec{v}_2 = \vec{V}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v} \end{aligned}$$

En passant aux variables $\vec{V}_G, \vec{v}$ l'expression (48) devient :

$$\sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{8\pi |\Delta E|^3 v_1^3 v_2} \int d\vec{v} d\vec{V}_G \delta(\xi_1 - v_1) \delta(\xi_2 - v_2) \frac{V_G^2}{v} \left(1 - \cos^2 \theta + \frac{\Delta E \cos \theta}{\mu v V_G}\right) \quad (49)$$

$\vec{V}_G$ ayant été choisi comme axe polaire, l'intégration sur θ, φ_G est immédiate de même que celle sur l'angle azimutal φ_v de $\vec{v}$. L'équation (49) devient :

$$\sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2) = \frac{\pi (Z_1 Z_2 e^2)^2}{|\Delta E|^3 v_1^3 v_2^2} \int_0^\infty dv \int_0^\infty dV_G \int v V_G^4 \delta(\xi_1 - v_1) \delta(\xi_2 - v_2) \left(1 - \cos^2 \theta + \frac{\Delta E \cos \theta}{\mu v V_G}\right) \sin \theta d\theta \quad (50)$$

Les limites d'intégration sur θ étant données par la condition de compatibilité (44), les intégrations successives se font moyennant la connaissance de la relation :

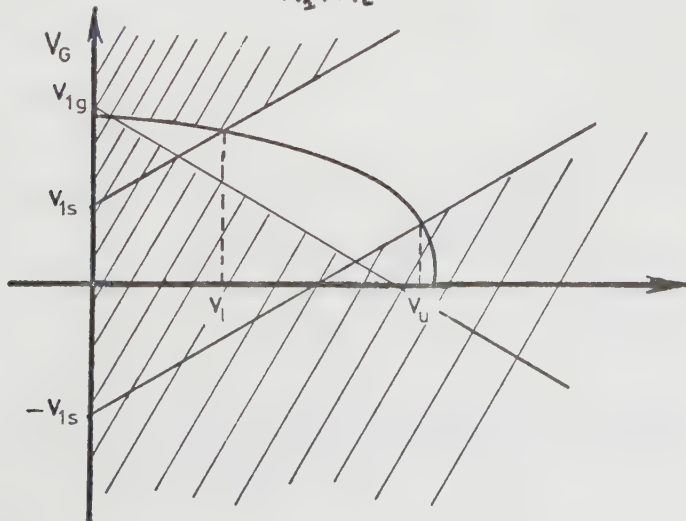
$$\int_a^b f(x) \delta[q(x)] dx = \sum_i \frac{f(x_i)}{|q'(x_i)|} \Big|_{x=x_i} \quad x_i \in [a, b] ; q(x_i) = 0 \quad (51)$$

L'intégration sur θ , compte tenu de la relation de compatibilité (44) donne pour les variables V_G et v les conditions :

$$\left. \begin{aligned} \left(V_G - \frac{m_2}{m_1 + m_2} v\right)^2 &\leq v_{1s}^2 & v_{1s} &= \min\{v_1, v_1'\} \\ \left(V_G + \frac{m_1}{m_1 + m_2} v\right)^2 &\geq v_{1g}^2 & v_{1g} &= \max\{v_1, v_1'\} \end{aligned} \right\} \quad (52)$$

D'autre part, la conservation de l'énergie donne :

$$E_1 = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) V_G^2 + \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v^2 \quad (53)$$



V_G et v doivent appartenir à la portion de l'ellipse définie par (53) et se trouver dans la zone non hachurée définie par les conditions (52). L'intersection de l'ellipse avec cette zone donne pour v deux limites d'intégrations v_l et v_u .

Nous intégrerons d'abord sur V_G au moyen de (51) puis sur v .

Le résultat final en fonction de v_l et v_u sera :

$$\sigma_{\Delta E}^{el} (v_l, v_u) = \frac{\pi (z_1 z_2 e^2)^2}{4 |\Delta E|^3 v_l^2 v_u^2} \left\{ (v_l^2 - v_u^2) (v_l'^2 - v_u'^2) (v_l^{-1} - v_u^{-1}) + (v_l^2 + v_l'^2 + v_u'^2 + v_u^2) (v_u - v_l) - \frac{4}{3} (v_u^3 - v_l^3) \right\} \quad (54)$$

Les limites d'intégration v_l et v_u dépendent de la manière dont l'ellipse coupe la zone d'intégration. Il existe quatre cas différents d'intersection et un cinquième où il n'y a pas d'intersection.

La discussion de ces différentes éventualités conduit à l'ensemble des possibilités suivantes :

1)	$v_l = v'_2 - v'_1$ $v_u = v_2 - v_1$	$v_u = v'_1 + v'_2$ $v_u = v_1 + v_2$	$\Delta E \geq 0$ $\Delta E \leq 0$	}	
avec	$\Delta E \geq \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left[E_1 - E_2 + \left E_1 \frac{v_2}{v_1} - E_2 \frac{v_1}{v_2} \right \right]$				1 (a)
et	$2 m_2 v_2 \geq m_1 - m_2 v_1$				1 (b)
2)	$v_l = v'_2 - v'_1$ $v_l = v_2 - v_1$	$v_u = v_1 + v_2$ $v_u = v'_1 + v'_2$	$\Delta E \geq 0$ $\Delta E \leq 0$	}	
lorsque $m_1 > m_2$					
$\frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left[E_1 - E_2 - E_1 \frac{v_2}{v_1} + E_2 \frac{v_1}{v_2} \right] \leq \Delta E \leq \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left[E_1 - E_2 + E_1 \frac{v_2}{v_1} - E_2 \frac{v_1}{v_2} \right]$					(55)
3)	$v_l = v_1 - v_2$ $v_l = v'_1 - v'_2$	$v_u = v_2 + v_1$ $v_u = v'_2 + v'_1$	$\Delta E \geq 0$ $\Delta E \leq 0$	}	
avec	$\Delta E \leq \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left[E_1 - E_2 - \left E_1 \frac{v_2}{v_1} - E_2 \frac{v_1}{v_2} \right \right]$				3 (a)

$$\text{et} \quad 2m_1v_1 \geq |m_1 - m_2|v_2 \quad \Delta E \leq 0 \quad 3(b)$$

$$4) \quad \begin{array}{lll} v_e = v_1 - v_2 & v_u = v_1 + v_2 & \Delta E \geq 0 \\ v_e = v'_1 - v'_2 & v_u = v'_1 + v'_2 & \Delta E \leq 0 \end{array}$$

lorsque $m_1 < m_2$

$$\frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2} \left[E_1 - E_2 - E_1 \frac{v_2}{v_1} + E_2 \frac{v_1}{v_2} \right] \leq \Delta E \leq \frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2} \left[E_1 - E_2 + E_2 \frac{v_1}{v_2} - E_1 \frac{v_2}{v_1} \right]$$

$$5) \quad \sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2) \equiv 0$$

pour $\Delta E \geq 0$ si la condition (1a) est remplie mais (1b) ne l'est pas.

$\Delta E \leq 0$ si la condition (3a) est remplie, mais (3b) ne l'est pas.

Notons que chaque fois que la relation suivante n'est pas satisfaite

$$-\frac{1}{2}m_2v_2^2 \leq \Delta E \leq \frac{1}{2}m_1v_1^2$$

$$\sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2) \equiv 0$$

D'autre part, il est possible d'appliquer cette méthode chaque fois que le potentiel est central.

3. Expression de $\sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2)$ dans le cas de chocs par une particule lourde $m_1 > m_2$ avec perte d'énergie de celle-ci ($\Delta E \geq 0$).

En posant :

$$\left. \begin{array}{l} a(v_2) = \frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2} \left[E_1 - E_2 - E_1 \frac{v_2}{v_1} + E_2 \frac{v_1}{v_2} \right] \\ b(v_2) = \frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2} \left[E_1 - E_2 + E_1 \frac{v_2}{v_1} - E_2 \frac{v_1}{v_2} \right] \end{array} \right\} \quad (56)$$

Nous pouvons avoir les quatre cas suivants :

$$\begin{array}{ll}
 1) \quad \Delta E \leq a(v_2) & \left. \begin{array}{l} v_e = v_1 - v_2 \quad v_u = v_1 + v_2 \\ v_e = v_1' - v_1' \quad v_u = v_1 + v_2 \\ 2m_2 v_2 \geq (m_1 - m_2) v_1 \quad v_e = v_1' - v_1' \quad v_u = v_1' + v_1' \end{array} \right\} (57) \\
 2) \quad a(v_2) \leq \Delta E \leq b(v_2) & \\
 3) \quad \Delta E \geq b(v_2) & \\
 4) \quad \sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2) \equiv 0 & \Delta E \geq b(v_2) \quad 2m_2 v_2 \leq (m_1 - m_2) v_1
 \end{array}$$

La section efficace d'ionisation d'une particule dont l'énergie de liaison vaut $U = \frac{1}{2} m_2 v_0^2$ et dont la vitesse après collision est v_2 , est donnée par les expressions de $\sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2)$ obtenues avec les conditions (57) et intégrées sur le transfert total possible d'énergie E_1 .

$$\sigma_i(v_1, v_2) = \int_U^{E_1} \sigma_{\Delta E}^{eff}(v_1, v_2) d(\Delta E) \quad (58)$$

D'autre part, la section efficace d'ionisation classique sera donnée par :

$$\sigma_i(v_1) = n_i \int_0^\infty \sigma_i(v_1, v_2) f(v_2) dv_2 \quad (59)$$

où n_i est le nombre d'électrons équivalents ayant une énergie de liaison U ($n_i = 2$ dans le cas des électrons-K) et $f(v_2)$ est la probabilité que les électrons aient la vitesse v_2 .

Du point de vue classique, /GA70/ (ensemble microcanonique)

$$f(v_2) = C^{te} v_2^2 \int_0^\infty \delta(H - E) 4\pi r_2^2 dr_2 = C^{te} v_2^2 \int_0^\infty \delta\left[\frac{m_2 v_2^2}{2} - \frac{Z_2 e^2}{r_2} + U\right] r_2^2 dr_2$$

En utilisant la relation (51) on montre que :

$$f(v_2) = C^{te} \frac{v_2^2}{(v_2^2 + v_0^2)^4}$$

Comme $f(v_2)$ est une probabilité et doit satisfaire :

$$\int_0^\infty f(v_2) dv_2 = 1$$

On montre que /DW57/

$$f(v_2) = \frac{32 v_0^5}{\pi} \frac{v_2^2}{(v_2^2 + v_0^2)^4} \quad (60)$$

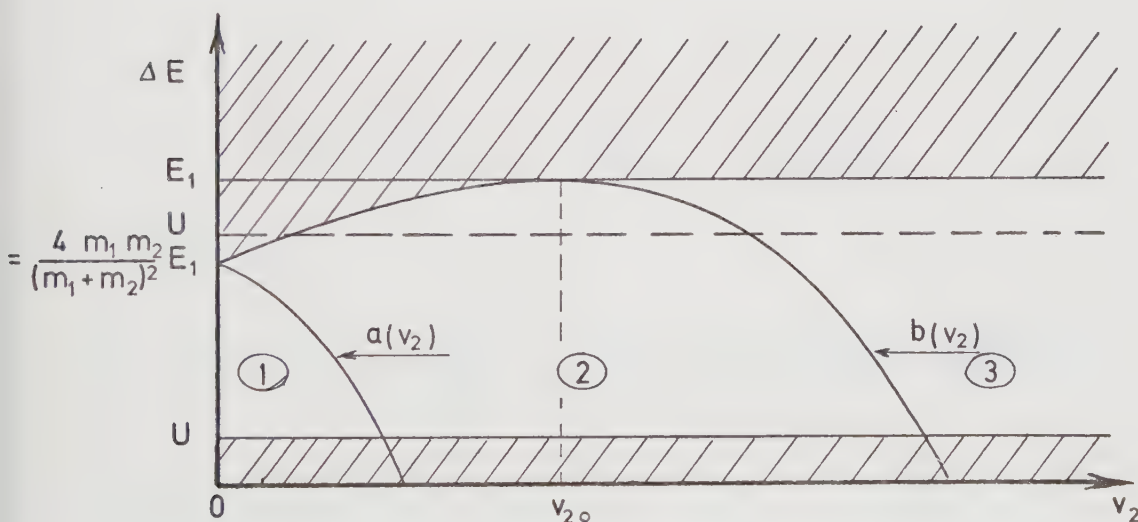
Ce résultat obtenu classiquement est identique à celui que l'on obtiendrait par un calcul quantique (théorème d'Ehrenfest).

Il nous faut déterminer le domaine d'intégration sur ΔE et v_2 .

On peut montrer que $a(v_2)$ et $b(v_2)$ sont deux paraboles centrées en v_{20} et $-v_{20}$ tel que $v_{20} = \frac{m_1 - m_2}{2m_2} v_1$

D'autre part $a(0) = b(0) = \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 = \Delta E_A$

et $b(v_2)$ atteint sa valeur maximale E_1 pour $v_2 = v_{20}$. Le domaine d'intégration permis pour ΔE et v_2 est représenté dans le schéma suivant par la zone non hachurée.



Pour les éléments moyens et pour des énergies E_1 des protons incidents telles que $E_1 < 2.3 \text{ MeV}$, le transfert d'énergie maximum pour $v_2=0$ est inférieure à l'énergie de liaison U_M .

Il existe trois zones définies par $a(v_2)$ et $b(v_2)$ dont il nous faut donner l'expression de (58) moyennant les conditions (57).

a) Dans la zone (1) $\sigma_{\Delta E}(v_1, v_2)$ est donnée par ($z_1 = 1$ $m_1 = m$):

$$\Delta E \leq a(v_2) \quad \sigma_{\Delta E}^{(1)} = \frac{\pi z_1^2 e^4}{3 v_1^2 \Delta E^3} \left(4 v_2^2 + 6 \frac{\Delta E}{m_2} \right)$$

L'intégration est immédiate et donne :

$$\sigma_i^{(1)}(v_1, v_2) = - \frac{\pi z_1^2 e^4}{3 v_1^2} \left(\frac{2 v_2^2}{\Delta E^2} + \frac{6}{m \Delta E} \right) \quad (61)$$

b) Dans la zone (2) $\sigma_{\Delta E}(v_1, v_2)$ est donnée par :

$$\sigma_{\Delta E}^{(2)} = \frac{\pi z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \frac{1}{\Delta E^3} \left[3(v_1^2 v_1' - v_2^2 v_2') + 4(v_1^3 + v_2^3) - 6 \Delta E \left(\frac{v_1}{m_1} - \frac{v_2}{m} \right) + v_1'^3 - v_2'^3 \right]$$

$$a(v_2) \leq \Delta E \leq b(v_2)$$

En exprimant $d(\Delta E)$ soit en fonction de v_1' soit de v_2' et sachant que :

$$3 \alpha^2 \int \frac{x^2 dx}{(\alpha^2 - x^2)^3} + \int \frac{x^4 dx}{(\alpha^2 - x^2)^3} = \frac{x^3}{(\alpha^2 - x^2)^2} \quad (62)$$

on obtient :

$$\sigma_i^{(2)}(v_1, v_2) = \frac{\pi z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \left[\frac{3}{\Delta E} \left(\frac{v_2}{m_1} - \frac{v_2}{m} \right) + \frac{(v_2'^3 - v_2^3) - (v_1^3 + v_1'^3)}{\Delta E^2} \right] \quad (63)$$

c) Dans la zone (3) $\sigma_{\Delta E}(v_1, v_2)$ est donnée par :

$$\Delta E \geq b(v_2) \quad 2 m v_2 \geq (m_1 - m_2) v_2$$

$$\sigma_{\Delta E}^{(3)} = \frac{\pi z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \frac{v_1'}{\Delta E^3} (3 v_1^2 + v_1'^2)$$

Comme pour la zone 2, en exprimant ΔE en fonction de v_1' et utilisant (62) on obtient :

$$\sigma_i^{(3)}(v_1, v_2) = - \frac{\pi z_1^2 e^4}{3 v_1^2 v_2} \frac{2 v_1'^3}{\Delta E^2} \quad (64)$$

L'intégration sur v_2 doit être effectuée numériquement à l'aide des expressions (61), (63) et (64), ΔE étant remplacée par $a(v_2)$, $b(v_2)$, U ou E_1 suivant le cas. (Voir figure page 39).

Remarquons cependant, que si l'on écrit formellement l'intégration sous forme de variables réduites telles que :

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \frac{v_1}{v_0} \\ \kappa_2 &= \frac{v_2}{v_0} \end{aligned} \quad (65)$$

et que nous portons l'intégration sur la variable réduite x_2 , on constate que le produit $U^2 \sigma(\kappa_1)$ n'est fonction que de la variable x_1 .

$$U^2 \sigma(\kappa_1) = F(\kappa_1) \quad (66)$$

on en déduit une conséquence importante relative à l'extrapolation des valeurs des sections efficaces.

En effet, si nous avons l'égalité :

$$\kappa_1 = \frac{v_1}{v_a} = \frac{v_1'}{v_b} \quad E_1' = \frac{U_b}{U_a} E_1$$

où U_b et U_a sont les énergies d'ionisation de deux éléments différents, nous avons pour (66) l'égalité :

$$\boxed{U_a^2 \sigma_a(E_1) = U_b^2 \sigma_b\left(\frac{U_b}{U_a} E_1\right)} \quad (67)$$

Cette relation est fondamentale. Elle montre qu'à partir de la connaissance des valeurs des sections efficaces pour un élément donné on en dérive celles de tous les autres éléments.

D'autre part, toujours en écrivant formellement l'équation (66) nous pouvons montrer que :

$$\sigma(x_1) = \frac{8\pi a_0^2 z_1^2}{z_2^4} \frac{F(x_1)}{x_1^2}$$

Comme,

$$x_1^2 = \frac{v_1^2}{v_0^2} = \frac{m}{m_1} \frac{E_1}{U} = \frac{m}{m_1} \frac{E_1}{z_2^2 R_y}$$

$$x_1^2 = \eta$$

(68)

η défini par (28)

la section efficace d'ionisation s'écrira sous la forme :

$$\sigma(\eta) = 8\pi a_0^2 \frac{z_1^2}{z_2^4} \frac{F(\eta)}{\eta} \quad (69)$$

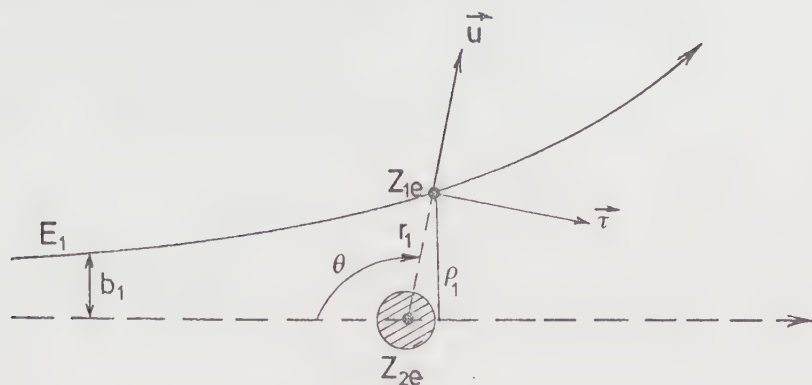
Expression analogue à celle obtenue par la méthode quantique (PWBA) et qui est présentée dans la formule (29).

Seule $F(\eta)$ peut avoir une forme différente de celle obtenue par la PWBA.

4. Terme correctif pour tenir compte de l'interaction coulombienne entre l'ion incident et le noyau de l'atome-cible.

L'effet de l'interaction coulombienne entre l'ion incident et le noyau sera de modifier la trajectoire supposée rectiligne dans toutes les formulations précédentes. Le mouvement classique de deux particules entre lesquelles existe une interaction centrale du type newtonienne est bien connue. Les trajectoires sont képlérienne et représentées dans le cas où la particule 1 n'est pas liée ($E_1 > 0$) par des hyperbolès.

En nous donnant les caractéristiques du mouvement :



où b_1 est le paramètre d'impact de l'ion incident, r_1 est donné en fonction de l'angle polaire θ_1 par :

$$\frac{1}{r_1} = \alpha_1 [\beta_1 \cos(\theta_1 - \theta'_1) - 1] \quad (70)$$

$$\alpha_1 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_1 b_1} \quad \beta_1 = \left[1 + \left(\frac{2E_1 b_1}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^2 \right]^{1/2}$$

$$\tan \theta'_1 = \frac{2E_1 b_1}{Z_1 Z_2 e^2}$$

Les constantes d'intégration étant données par les conditions initiales sur $\vec{r}_1$ et $\vec{v}_1$ à partir de :

$$\vec{v}'_1 = v_1 b_1 \left[- \frac{d\left(\frac{1}{r}\right)}{d\theta_1} \vec{u} + \frac{\vec{r}}{r_1} \right]$$

Le mouvement est symétrique par rapport à un axe passant par θ'_1 et si on rapporte à cet axe le mouvement dans le cas d'un potentiel répulsif l'angle polaire φ_1 variera de $-\theta'_1$ à θ'_1

Qualitativement, nous pouvons voir que l'existence d'un potentiel répulsif entraînera la diminution de la section efficace d'interaction et ceci sera d'autant plus sensible que l'énergie E_1 de la particule incidente sera petite.

La distance minimale d'approche classique se déduit aisément au moyen de la formule de conservation de l'énergie :

$$E_1 = E'_1 + \frac{z_1 z_2 e^2}{r_1}$$

r_1 sera minimal pour $E'_1=0$ et vaudra :

$$r_c = \frac{z_1 z_2 e^2}{E_1} \quad (71)$$

Soit r_A le rayon atomique moyen, distance la plus probable à laquelle puisse se trouver un électron défini de la façon suivante :

$$r_A = \frac{z_2 e^2}{2U} \quad (72)$$

L'énergie potentielle étant égale à l'énergie cinétique et valant la moitié de l'énergie d'ionisation, le tout en module.

Au sens classique, nous aurons collision si $r_c \leq r_A$ étant donné que la distribution des électrons-K est isotrope.

Pour dériver le terme correctif tenant compte de l'interaction coulombienne entre l'ion incident et le noyau atomique, nous allons suivre la procédure introduite par THOMAS /TH69/.

Partant de l'expression (70) pour r_1, θ'_1 et β_1 on montre que b_1 satisfait à l'équation du second degré :

$$b_1^2 - b_1 p_1 + \frac{z_1 z_2 e^2}{2E_1} (r_1 - (r_1^2 - p_1^2)^{1/2}) = 0$$

La seule solution acceptable telle qu'en absence de noyau ($z_2=0$) il n'y ait pas de répulsion coulombienne est donnée par :

$$b_1 = \frac{1}{2} \left[p_1 + \left\{ p_1^2 - \frac{z_1 z_2 e^2}{2E_1} [r_1 - (r_1^2 - p_1^2)^{1/2}] \right\}^{1/2} \right]$$

Soit $\sigma = \pi b_1^2$ et $\sigma' = \pi \rho_1^2$ les sections efficaces d'ionisation correspondant respectivement aux paramètres d'impacts b_1 et ρ_1 . On montre que :

$$\sigma = \sigma' \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\pi z_1 z_2 e^2}{2\sigma' E_1} \left[r_1 - (r_1^2 - \frac{\sigma'}{\pi})^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \right]^2 \quad (73)$$

Notons que σ' est la section efficace correspondant à l'énergie

$$E'_1 = E_1 - \frac{z_1 z_2 e^2}{r_1}$$

Si pour r_1 nous prenons la valeur r_A de (72), l'expression précédente devient :

$$E'_1 = E_1 - 2z_1 U \quad (74)$$

D'autre part, pour les éléments moyens $\pi r_A^2 \approx 10^5$ barns nous avons que $\sigma' \ll \pi r_A^2$. On en déduit pour σ la valeur approchée :

$$\sigma = \sigma' \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{z_1 U}{E_1} \right)^{1/2} \right]^2 \quad (75)$$

Notons que cette correction pour les éléments moyens et pour des énergies de l'ordre du MeV devient quasiment négligeable.

Dans l'expression (75) par rapport à celle donnée par GARCIA /GA70/ notre résultat diffère d'un facteur devant $\frac{U}{E_1}$. Notre expression a été obtenue en refaisant tous les calculs. Nous ne voyons pas l'origine de cette différence dans nos résultats.

CHAPITRE II

METHODE EXPERIMENTALE ET RESULTATS DES MESURES DE SECTIONS EFFICACES DE PRODUCTION DE RAYONNEMENT X_K SUR LES ELEMENTS Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni et Cu CONSECUTIF AU BOMBARDEMENT PAR DES PROTONS D'ENERGIE COMPRISE ENTRE 0,4 ET 2,3 MeV.

I. PRINCIPES DE LA MESURE.

La mesure de sections efficaces absolues de production de rayonnement X_K consécutif au bombardement par des protons est très difficile malgré l'importance de l'émission observée.

Les problèmes principaux dans l'ordre de difficulté sont les suivants :

- 1) l'estimation exacte du poids de la cible, celle-ci étant de l'ordre de quelques $\mu\text{gr}/\text{cm}^2$;
- 2) la détermination exacte des angles solides sous-tendus par les détecteurs à semi-conducteurs ainsi que leur efficience.
- 3) la mesure absolue du faisceau de particules chargées incidentes.

Toutes les déterminations effectuées jusqu'à présent n'ont pas pu dominer ces problèmes d'une manière suffisante, on peut estimer que ces données existantes sont précises à 25%.

Dans la suite du présent chapitre, nous décrirons la méthode que nous avons choisie et utilisée permettant de réduire les risques mentionnés précédemment au minimum possible.

Elle est basée sur la détermination du poids de la cible à partir de la diffusion élastique Rutherford et sur la mesure simultanée de cette diffusion et du rayonnement X. On élimine ainsi la première et la troisième source d'erreurs exposées précédemment.

II. DESCRIPTION EXPERIMENTALE.

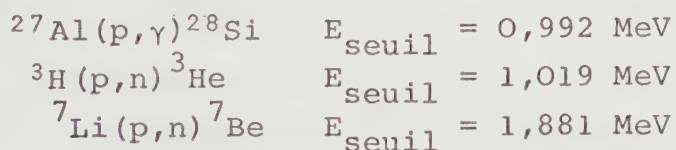
Nous avons effectué une série de mesures systématiques du rayonnement-X consécutif au bombardement sur les éléments moyens Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni et Cu pour des protons ayant une énergie comprise entre 0,4 et 2,3 MeV.

Les protons sont produits et accélérés par un accélérateur électrostatique Van de Graaff horizontal pouvant atteindre 3 MeV (HIGH VOLTAGE ENGINEERING). Cependant, la tension maximale garantie de 2,5 MeV a limité nos mesures à 2,3 MeV.

Le faisceau de protons est analysé et défléchi magnétiquement par un électroaimant, la déflexion est effectuée à un angle de $17^{\circ}5$.

La stabilité en énergie du faisceau est assurée au moyen de collimateurs permettant de sélectionner des protons d'énergie suffisamment monocinétiques. Les protons accélérés possèdent une distribution gaussienne en énergie et l'analyse magnétique produit une dispersion caractérisée par le produit masse-énergie. Les fentes que nous avons utilisées permettent d'avoir des protons dont l'énergie est connue au keV près. D'autre part, l'analyseur magnétique étant très stable ($1/10000$), l'instabilité que l'on pourrait lui imputer est négligeable.

L'étalonnage en énergie de la machine a été obtenue au moyen des trois réactions suivantes dont les seuils sont très bien connus :



Ces réactions permettent d'étalonner la résonance proton de l'analyseur magnétique et obtenir une relation reproductible dans le domaine d'énergie qui nous intéresse entre l'énergie E_p des protons incidents et la fréquence ν de la résonance proton, de la forme :

$$E_p = K v^2 + c^{te}$$

La précision totale de la détermination de l'énergie des protons est de l'ordre de 0,5 ‰ soit 1 keV pour des protons de 2 MeV.

Les protons traversent ensuite une cellule contenant une jonction annulaire à semi-conducteur du type "barrière de surface" (ORTEC) permettant la mesure des particules rétrodiffusées à 180°.

Le faisceau de protons arrive sur une cible mince, de l'ordre de 100 $\mu\text{gr}/\text{cm}^2$, tournante dont la rotation est de 1 tour/seconde à 45°.

Ceci pour les deux raisons suivantes :

- 1) éviter les effets d'inhomogénéité de la couche mince,
- 2) éviter un échauffement local pouvant conduire à la destruction de la cible.

L'intensité moyenne du faisceau de protons est de l'ordre de 10 nanoAmpères.

La section efficace de production du rayonnement X variant considérablement avec l'énergie des protons incidents (de l'ordre du barn pour 0,4 MeV au millier de barns pour 2 MeV) l'intensité du faisceau a été adaptée de manière à respecter un taux de comptage raisonnable dans les détecteurs, lors de chaque mesure.

Le tambour porte-cible est isolé de l'enceinte à vide pour permettre une lecture du courant produit par la collection des protons incidents sur la cible et fournit ainsi la possibilité de connaître le nombre de particules incidentes.

L'ensemble du porte-échantillon est lui-même isolé du reste de l'appareillage et porté à un potentiel négatif de -100 volt pour obtenir la suppression des électrons secondaires produits par l'ionisation des atomes de la cible.

La fenêtre permettant le passage du rayonnement X est à 90° par rapport au faisceau incident, constitué par une feuille de mylar dont l'épaisseur est de 1,5 mgr/cm^2 absorbant environ 5% du rayonnement. ($E_X \approx 5\text{keV}$).

Le rayonnement-X est détecté dans un détecteur à semi-conducteur du type silicium drifté au lithium (KEVEX) de très bonne résolution (180 eV).

L'accumulation et le traitement des données est effectué en ligne grâce à un système ADC-Ordinateur de type Hewlett-Packard (8K mémoire de 16 bits).

L'ensemble de l'appareillage expérimental est représenté dans la figure n°1. Le détail de la chambre à vide est résumé à la figure n° 2.

III. MESURES D'EXCITATION.

Malgré l'allure monotone des courbes de sections efficaces, nous avons tenu à effectuer de nombreuses mesures intermédiaires à différentes énergies de protons incidents en vue de réduire d'éventuelles erreurs systématiques.

En multipliant le nombre de mesures et en procédant dans des conditions expérimentales différentes, nous évitons certains accidents indésirables tels qu'un point d'impact particulier sur la cible, les erreurs occasionnelles de manipulation, etc...

Les mesures d'excitation sont faites par pas de 100 keV entre 0,4 et 2,3 MeV en monitorant sur le courant produit par la collection des protons incidents. Ce pas est satisfaisant et permet d'avoir une bonne connaissance des courbes de sections efficaces dans une zone où les prédictions des deux modèles théoriques disponibles (PWBA et BEA) sont en désaccord.

1. Choix des cibles.

1.1. Epaisseur. _ _

Les cibles utilisées doivent posséder le caractère particulier d'être minces. Ceci afin d'éviter les effets suivants :

- autoabsorption pour les rayons-X émis,
- trop grande variation de l'énergie des protons incidents au cours de la pénétration dans la cible.

Nous avons adopté le choix de $70 \mu\text{gr}/\text{cm}^2$ d'élément pur, ce qui correspond à une perte d'énergie totale de 10 keV pour des protons incidents de 1 MeV soit en moyenne une perte inférieure à 5 keV

1.2. Mode de préparation et pureté. _

Les corps analysés appartenant à la région du Fer sont sous forme métallique et les couches minces sont obtenues par évaporation dans un système Balzer comprenant un groupe de pompage de haute performance et une chambre d'évaporation de 35 litres.

Le choix de la barquette d'évaporation doit être judicieux. En effet, nous avons constaté qu'en employant du tantale comme matériau d'évaporation dans le cas du cuivre, il se formait un amalgame Ta-Cu qui s'évaporait d'abord et se trouvait en sandwich entre le support et la couche d'élément pur. (Figure₃). La pureté des éléments que nous avons employé est de 99,99% La pureté des cibles ainsi obtenue a été examinée à la fois par l'observation du rayonnement-X et par le spectre de rétrodiffusion à 180° . L'examen du rayonnement-X à lui seul n'est pas suffisant car il peut se produire des cas d'interférences avec des éléments dont les raies-L viennent à coïncider avec les raies-K du corps étudié.

1.3. Supports. _ _

Le choix du support des cibles doit être effectué avec précaution. les éléments qui le composent doivent être tels que le rayonnement-X qu'ils sont susceptibles d'émettre ne vienne pas à interférer avec celui des corps étudiés et ne doit pas être plus énergétique que le rayonnement étudié, car sinon il se produirait une augmentation du temps mort dans la détection.

Pour cela, le support devra être constitué par des éléments légers se situant au-dessous de l'aluminium.

Après divers essais, notre choix s'est porté sur le mylar matériau essentiellement composé de carbone et d'oxygène, poids = $1,5 \text{ mg}/\text{cm}^2$ et de formule chimique $\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4$ et de densité $1,38 \text{ g}/\text{cm}^3$.

Le mylar possède une surface lisse qui permet une bonne adhérence des couches minces métalliques (pas d'effets de pelure). C'est un élément de très grande pureté de composition. La préparation et la manipulation des cibles ainsi obtenues est très aisée.

Un autre avantage du mylar réside dans le fait que dans les mesures de rétrodiffusion à 180° , les éléments qui le constituent ne viennent jamais interférer avec ceux que nous analysons.

Nous avons représenté sur la figure 4 la variation de l'énergie des protons en fonction de l'angle de rétrodiffusion pour le carbone, l'oxygène et les deux éléments extrême : (Titane, cuivre, et les énergies incidentes 0,5 ; 1 et 2 MeV

$$E(\theta) = E_0 \left(1 - \frac{2m_2 m_1}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos\theta) \right)$$

Cependant, les protons de 2 MeV traversent la couche mince et le support en mylar.

Nous devons placer derrière la cible une pastille de graphite de telle sorte que toutes les particules incidentes y soient arrêtées. Ainsi il ne peut exister d'interférences entre le rayonnement étudié et celui qui pourrait être émis par le tambour métallique.

2. Distance de détection.

Le détecteur à semi-conducteur Si(Li) est placé à 10 cm du point d'impact des protons sur la cible.

Cette distance est un compromis entre :

- l'intensité du faisceau,
- les erreurs pouvant intervenir dans la correction de l'absorption du rayonnement lors de son parcours dans l'air.
- le temps de comptage
- et surtout, les erreurs sur la détermination de l'angle solide sous-tendu par le détecteur.

3. Mesure du poids de la cible.

La détermination du poids de la cible se fait à partir de la diffusion élastique Rutherford des protons à 180° . En effet, le nombre de protons diffusés par un atome en fonction de l'angle de diffusion est donné par :

$$N_R = N_i n_{\text{at/cm}^2} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Ruth}} \Omega_R \quad (1)$$

Connaissant N_i le nombre de protons incidents au moyen de la lecture du courant recueilli sur le tambour porte-cible, N_R le nombre de protons rétrodiffusés en intégrant le pic de rétrodiffusion élastique et σ_{Ruth} au moyen de l'expression théorique suivante /MA67/ :

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Ruth}} = 1.296 \cdot 10^{-3} \left(\frac{Z_1 Z_2}{E(\text{neV})} \right)^2 \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\phi}{2}} - 2 \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^2 \right\} \quad (2)$$

l'indice (1) étant relatif à la particule incidente et (2) à l'atome cible.

Nous pouvons en déduire le nombre d'atomes par unité de surface.

Dans la pratique, on connaît le nombre de protons rétrodiffusés par μC de protons incidents, on montre que l'expression du nombre d'atomes par cm^2 sera donné par :

$$n_{\text{at/cm}^2} = 1.652 \cdot 10^{17} \frac{N_R / \mu\text{C}}{\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Ruth}} \Omega_R} \quad (3)$$

le poids de la cible par unité de surface s'en déduit aisément

$$P_{\mu\text{g/cm}^2} = 0.266 \frac{N_R / \mu\text{C}}{\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Ruth}} \Omega_R} M_2 \quad (4)$$

4. Mesures d'excitation.

Les mesures d'excitation sont faites par pas de 100 keV entre 0,4 et 2,3 MeV en monitorant sur le courant produit par la collection des protons incidents.

La figure 5 présente le dispositif électronique de détection.

La stabilité du moniteur en courant est telle que des mesures successives tombent dans la barre d'erreur due à la statistique.

IV. MESURE ABSOLUE.

Après avoir effectué la mesure d'excitation à une distance de 10 cm, nous procédons à une mesure absolue de normalisation pour une énergie de protons incidents de 1,5 MeV.

La section efficace de production du rayonnement-X est alors suffisamment élevée (100 barns) pour permettre le recul du détecteur à une distance de 20cm et minimiser ainsi l'erreur pouvant s'introduire sur l'angle solide sous-tendu par le Si(Li) tout en gardant un temps de comptage raisonnable.

De plus, afin d'éviter les erreurs pouvant provenir de l'intégration du courant sur la cible (mauvaise conductivité électrique des cibles, électrons secondaires, pertes de charge_s dans les lignes par suite des faibles courants mesurés...) on procède à la mesure simultanée du nombre de protons rétrodiffusés élastiquement et du nombre de rayons X émis dans la couche mince. L'angle de détection ($\theta=180^\circ$) des particules rétrodiffusées a été choisi pour les deux raisons suivantes :

1°- Cette géométrie nous permet une meilleure séparation en énergie des éléments présents. Les protons n'étant pas totalement arrêtés dans la couche mince du corps pur étudié, nous aurons en plus du pic élastique de rétrodiffusion un plateau correspondant aux protons rétrodiffusés sur le carbone et l'oxygène du support

de cible et de la pastille de graphite.

2°- D'autre part, une incertitude de quelques degrés sur la détermination précise de l'angle de détection n'entraîne pas une erreur importante sur la détermination de la section efficace absolue puisque celle-ci varie comme $1/\sin^4(\theta/2)$ ($\theta \approx 175^\circ$).

Nous avons représenté à la figure 7 le spectre de rétrodiffusion à 180° obtenu par bombardement d'une couche mince de cuivre.

La détection des particules rétrodiffusées se fait au moyen d'une jonction annulaire à semi-conducteur du type "barrière de surface" sur laquelle nous avons placé un collimateur circulaire de diamètre 7^{mm} mesuré avec précision. Ceci permet d'avoir une bonne définition de la surface utilisée et minimise l'erreur pouvant s'introduire dans l'angle solide sous-tendu par ce détecteur. La partie centrale de la jonction annulaire est percée d'un trou de diamètre égal à 4mm. La distance de rétrodiffusion est de 10cm.

Le nombre de protons rétrodiffusés est obtenu en plaçant une fenêtre sur le pic de diffusion élastique provenant de la couche mince, c'est-à-dire en mettant un seuil inférieur et un seuil supérieur de part et d'autre du pic afin de ne compter que les protons provenant de la collision élastique avec les atomes de l'élément étudié. Ce sont ces protons qui servent de référence lors de la mesure absolue du rayonnement X.

Comme le montre la figure représentant la cinématique de la diffusion Rutherford, la séparation en énergie du pic de rétrodiffusion élastique est telle qu'un déplacement vers le bas du seuil inférieur de l'ordre de 50 keV n'entraîne pas une variation supérieure à 1 % sur le nombre de protons comptés dans la fenêtre.

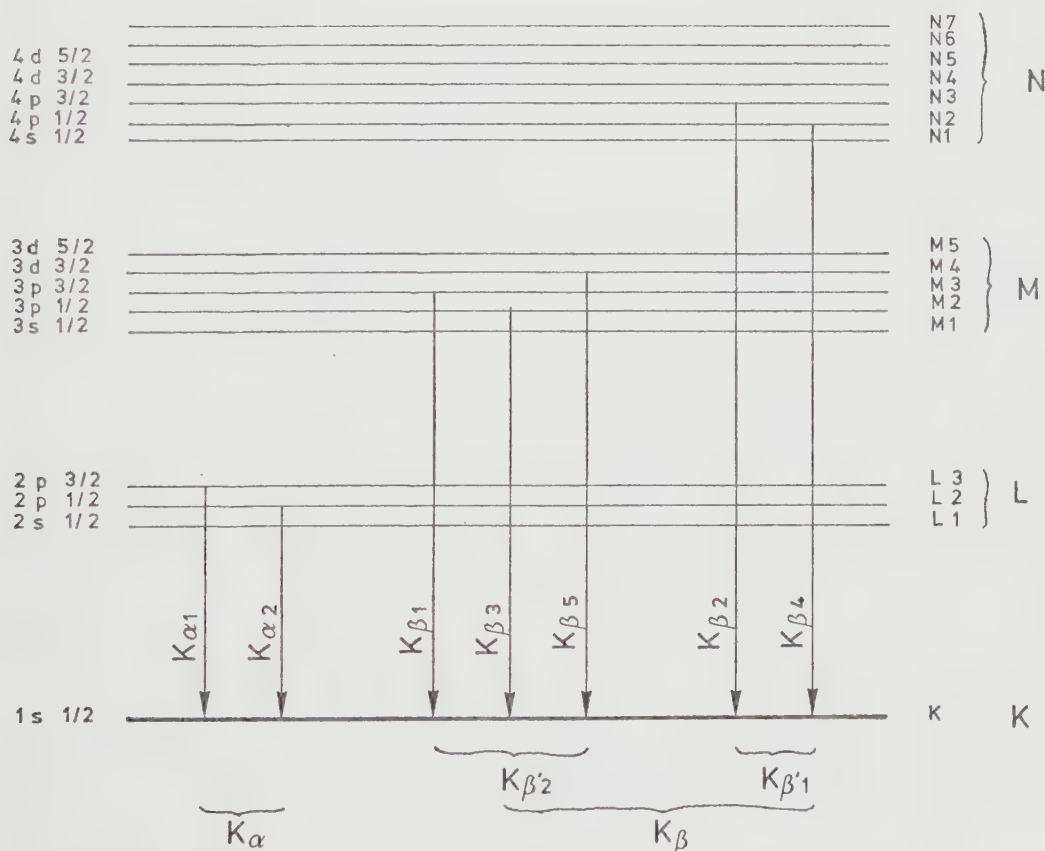
D'autre part, un analyseur multicanal de 256 canaux (Northern) reste en permanence branché en parallèle sur la chaîne de détection des protons rétrodiffusés et permet de contrôler pendant l'expérience la stabilité de la fenêtre.

Par cette méthode, nous éliminons les incertitudes qui pourraient venir de l'estimation de la lecture de courant et de la détermination du poids de la cible.

Après avoir effectué le calcul des sections efficaces absolues de production de rayonnement-X en tenant compte de tous les termes correctifs sur la géométrie et l'absorption, nous normalisons l'ensemble des valeurs obtenues lors de la mesure d'excitation aux résultats précédents les différentes erreurs pouvant affecter les quantités absolues sont, par suite même de la méthode expérimentale utilisée, considérablement minimisées.

Cette normalisation s'effectue par une simple règle de trois.

D'autre part, la très bonne résolution (180 eV) du détecteur Si(Li) de rayonnement-X permet la séparation des transitions K_α et K_β dont les composantes sont définies dans le schéma suivant :



Un exemple de ces transitions telles qu'on peut les observer sur l'écran de visualisation de l'ordinateur Hewlett-Packard est représenté à la figure 8.

Le dispositif électronique associé à cette mesure est représenté à la figure 6.

La mesure absolue s'effectue toujours en cible tournante inclinée à 45° pour les mêmes raisons que celles invoquées au paragraphe n°2.

Le calcul des sections efficaces d'émission de rayonnement X consécutif au bombardement par des protons s'effectue au moyen de l'expression :

$$\sigma_X = \frac{A}{N_i} \frac{4\pi}{\Omega_X} \frac{N_X}{n_{at/cm^2}} \quad (5)$$

où A est un facteur correctif supérieur à l'unité tenant compte principalement de :

- l'efficience du détecteur de rayonnement-X Si(Li)
- l'absorption dans les fenêtres de mylar et de Beryllium.
- l'absorption due au parcours dans l'air du rayonnement-X.
- du temps mort de l'analyseur.

L'émission du rayonnement étant isotrope, nous obtenons directement la valeur de la section efficace de production de rayonnement-X par un simple règle de trois.

Comme on procède à la mesure simultanée des protons de rétrodiffusion et du rayonnement-X en remplaçant dans l'expression (5), la valeur du nombre d'atomes par centimètre carré n_{at/cm^2} donnée par (1), on obtiendra la formulation suivante pour σ_X :

$$\sigma_X = 4\pi A \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{R_{uH}} \frac{N_X}{N_R} \frac{\Omega_R}{\Omega_X} \quad (6)$$

On constate que l'expression de σ_X ne dépend plus du nombre de protons incidents N_i , ni du nombre d'atomes par unité de surface n_{at/cm^2} , mais uniquement du rapport des angles solides.

L'intégration des pics, c'est-à-dire l'évaluation du nombre de photons-X détectés s'obtient par un sous-programme de dépouillement en deux gaussiennes dont le principe est exposé en appendice.

V. DEPOUILLEMENT.

Le sous-programme de dépouillement en gaussiennes est inclu au programme de gestion des acquisitions de données de l'ordinateur.

C'est pourquoi, le traitement de l'information obtenue s'effectue après chaque mesure.

Nous allons envisager successivement les diverses corrections à apporter aux valeurs de la section efficace que nous pouvons obtenir à partir des résultats donnés par le sous-programme de dépouillement. Ces corrections, nous les avons résumées par le facteur A dans l'expression (6).

1. Efficience de la jonction de rétrodiffusion. _

L'épaisseur de la jonction étant de $100\ \mu$ est largement supérieure au parcours des protons les plus énergétiques. Pour des protons de 2,3 MeV, ce dernier étant de 60μ .

Les protons sont totalement arrêtés dans le détecteur et l'efficience est de 100%, ce qui ne nécessite aucune correction.

2. Efficience du détecteur de rayonnement-X. _

Un détecteur à semi-conducteur de rayonnement-X est essentiellement constitué par un cristal de Silicium présentant une surface rigoureusement plane. Dans ce matériau et aux énergies que nous envisageons (4 à 7 keV), l'interaction est de nature photo-électrique. L'effet Compton est inférieur à 2,5 ‰.

L'efficience du détecteur est donc un produit de facteurs de transmission de la fenêtre de Beryllium du cryostat, de la couche d'or et d'un terme d'absorption dans le silicium.

A la figure 9 se trouve représentée une courbe d'efficience calculée pour notre détecteur.

Nous constatons que celle-ci pour l'énergie du rayonnement X des éléments que nous avons étudiés, est voisine de 100%.

Nous avons adopté cette valeur et avons estimé son exactitude à 1% près.

D'autre part, nous pouvons observer dans le spectre du rayonnement-X un pic parasite appelé pic d'échappement. Son existence est liée à l'ionisation de la couche-K du Silicium, ce qui correspond à une énergie des rayons-X de la réaction envisagée diminués de 1.74 keV.

Son effet sera d'ignorer une fraction du rayonnement-X venant sur le détecteur. Nous avons estimé son effet inférieur à 1°/∞ du rayonnement détecté. Nous l'avons négligé par la suite.

L'erreur est systématique. Le sens en est connu.

3. Absorption dans la fenêtre en mylar. _

Pratiquement, nous mesurons pour chaque élément et pour les transitions K_{α} et K_{β} ce terme d'absorption en interposant entre la fenêtre et le détecteur, une seconde feuille de mylar identique à celle constituant la fenêtre et provenant du même échantillon.

L'absorption varie exponentiellement avec l'épaisseur. Si a_{myl} est le terme d'absorption dû à une feuille, celui correspondant à l'interposition de deux feuilles sera simplement a_{myl}^2 .

Le terme correctif, pour chacun des rayonnements K_{α} et K_{β} et pour chaque élément étudié, sera simplement donné comme le rapport de la valeur intégrée du nombre de coups sous un pic pour la fenêtre seule, à celle obtenue après l'interposition de la seconde feuille..

Ce terme dépend naturellement de l'épaisseur du mylar utilisé.

L'erreur est essentiellement de type statistique.

4. Absorption due au parcours du rayonnement dans l'air.

Lorsque les photons-X parcourent la distance située entre la fenêtre de mylar et le détecteur, ils perdent graduellement leur énergie et seule une fraction de ceux-ci sont détectés.

L'absorption de ces photons est décrite de façon classique par une décroissance exponentielle en fonction de la distance parcourue.

Si $I_i(0)$ est l'intensité du rayonnement émis par un élément i , après un parcours d dans l'air de masse spécifique ρ , l'intensité $I_i(d)$ sera donnée par :

$$I_i(d) = I_i(0) e^{-\bar{\mu}_i \rho d}$$

$\bar{\mu}_i$ est le coefficient massique (g/cm^2) dans les conditions normales de température et de pression moyenne sur tous les éléments (j) constitutifs de l'atome :

$$\bar{\mu}_i = \sum_j \mu_{ij} \xi_j \quad \sum_j \xi_j = 1$$

ξ_i est le titre pondéral et μ_{ij} est le coefficient d'absorption massique du rayonnement de l'élément i par l'élément j .

L'absorption est différente pour les différents types de transition car les photons K_α moins énergétiques sont plus absorbés que les K_β .

Nous avons adopté la composition suivante pour l'air :

78% d'Azote

21% d'Oxygène

1% d'Argon.

La valeur de $\rho = 1,293 \text{ mg/cm}^3$.

L'Argon, bien qu'étant présent en faible proportion (1%) ne doit pas être négligé car son coefficient massique d'absorption pour les éléments moyens est fort important.

D'autre part, la masse spécifique de l'air varie avec la température et la pression atmosphérique comme :

$$\rho_1 = \rho_0 \frac{T_0}{T_1} \frac{P_1}{P_0}$$

Nous devons tenir compte de l'incertitude liée à la détermination de ces quantités.

Les valeurs des coefficients μ_{ij} utilisées sont celles de LIEBHAFSKY /LI60/ calculés à partir de la théorie de HEINRICH. L'erreur est systématique.

5. Angles solides.

5.1 angle solide de rétrodiffusion.

La surface utile de la jonction permettant la détection des protons rétrodiffusés est définie au moyen d'un collimateur circulaire calibré dont le diamètre est connu avec une grande précision.

L'erreur principale à imputer sur l'angle solide de rétrodiffusion est due à la mesure de la distance de rétrodiffusion.

L'erreur sur l'angle solide de rétrodiffusion est du type systématique.

5.2 Angle solide de détection du rayonnement.

De même que dans le cas de la rétrodiffusion, un collimateur calibré définit la surface de détection.

L'erreur imputable sur l'angle solide de détection du rayonnement sera principalement dû à la mesure de la distance.

L'erreur est systématique.

6. Energie. _

Nous avons vu que la définition en énergie des protons incidents était très bien connue.

Les seules corrections pouvant intervenir sont :

- la perte d'énergie des protons dans la cible. Nous avons choisi un poids de cible tel que cet inconvénient soit négligeable.
- la dimension du faisceau de protons. Dans tous les calculs nous avons supposé que le faisceau de protons était ponctuel. Cependant, en pratique, il a une certaine étendue spatiale et ceci peut introduire un facteur d'erreur.

L'erreur est systématique.

7. Dépouillement. _

Par suite même du traitement de l'information obtenue au moyen des mesures que nous avons effectuées et du caractère de celles-ci, les résultats sont entachés d'une certaine erreur.

7.1 Pic de rétrodiffusion. _

En donnant à la mesure une durée plus ou moins longue et en choisissant un collimateur approprié (diamètre permettant un comptage suffisant des protons rétrodiffusés) nous sommes maîtres de l'erreur qui lui est associée.

L'erreur est statistique.

7.2 Rayonnement X primaire.

Comme dans le cas précédent, nous avons le même remède pour les mêmes causes.

L'erreur est statistique.

7.3 Rayonnement X secondaire.

Nous avons toujours supposé que le rayonnement-X produit par le bombardement des protons était produit par les protons incidents.

Nous avons vu, toutefois, que, par suite de la rétrodiffusion élastique, aussi bien dans la couche mince que dans le support et la pastille de graphite, les protons revenaient vers l'arrière. Ils peuvent produire sur le chemin du retour un rayonnement-X.

Nous pouvons avoir une estimation de cet effet en tenant compte surtout des particules rétrodiffusées dans la couche mince et son support. En effet, la section efficace de production de rayonnement-X augmentant avec l'énergie sera d'autant plus faible que les particules seront peu énergétiques. En tenant compte de la perte d'énergie des protons avant la rétrodiffusion et après la rétrodiffusion, nous pouvons penser que cet effet sera faible.

L'erreur est systématique.

Nous présentons dans le tableau suivant un résumé de toutes ces sources d'erreurs, en donnant leurs origines, leurs caractères et notre estimation.

8. Remarques. _ _

Pour le calcul des sections efficaces absolues, nous négligerons tous les processus d'excitation dont la contribution est infime. Il en résultera une faible erreur systématique.

- Les énergies de liaison observées sont des quantités suffisamment bien connues /BE67/ pour les considérer comme entachées d'une erreur infiniment négligeable.
- le facteur Auger ω_K . Il y réside une source d'erreur systématique. Nous prendrons une estimation moyenne (5%) déduite des résultats consignés dans l'article de BAMBYNEK /BA72/

SOURCE , TYPE et ESTIMATION des ERREURS.		
Origine	Caractère	Estimation en % sur les sections efficaces
<u>Efficience des détecteurs</u> -rétrodiffusion des protons -rayonnement X	systématique systématique	nulle -1%
<u>Absorption</u> -fenêtre en mylar -parcours dans l'air	statistique systématique	+ 2% + 3%
<u>Angles solides</u> -rétrodiffusion -rayonnement X	systématique systématique	+ 3% + 2%
<u>Energie</u> -énergie incidente des protons -perte d'énergie des protons dans la cible	systématique systématique	+ 1% + 1.5%
<u>Dimension du faisceau</u>	systématique	se répercute sur les angles solides
<u>Dépouillement</u> -rétrodiffusion -rayonnement X	statistique statistique	< 1% < 1%

VI. RESULTATS RELATIFS AUX SECTIONS EFFICACES DE PRODUCTION DE RAYONNEMENT- X_K

Se trouvent représentées dans les tableaux pages suivantes en fonction de l'énergie des protons incidents les variations des quantités :

- sections efficaces expérimentales de production de rayonnement K_α et K_β
- rapports expérimentaux des transitions K_β aux K_α
- sections efficaces expérimentales de production de rayonnement X_K
- sections efficaces expérimentales d'ionisation de la couche K.
- sections efficaces théoriques d'ionisation de la couche-K (BEA et PWBA) et respectivement, le rapport des valeurs obtenues expérimentalement à ces quantités.

Le poids des cibles utilisées est le suivant :

Ti	61 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$
V	63
Cr	92
Mn	128
Fe	68
Co	151
Ni	62
Cu	84

Afin d'obtenir l'expression des sections efficaces d'ionisation expérimentales, nous avons utilisé les valeurs du coefficient de fluorescence ω_K donné par la formule semi-empirique suivante :

$$[\omega_K/(1-\omega_K)]^{1/4} = A + BZ + CZ^3$$

Les valeurs des constantes semi-empiriques sont celles données par BAMBYNEK et al /BA72/

$$\begin{aligned} A &= 0.015 \pm 0.010 \\ B &= 0.0327 \pm 0.0005 \\ C &= -(0.64 \pm 0.07) 10^{-6} \end{aligned}$$

Les valeurs du facteur Auger ω_K ainsi obtenues sont précises à $\pm 5\%$.

Nous avons préféré ces valeurs plus récentes à celles de HAGEDOORN et WAPSTRA /HA60 / qui sont inférieures de 25% par rapport à celles que nous avons adopté.

Nous signalons que des valeurs théoriques, calculées dans l'approximation non relativiste par WALTERS et BHALLA /WA71/, donnent des valeurs comparables à celles que nous avons utilisées, quoique légèrement supérieures. (L'écart augmentant avec le numéro atomique).

Nous rappelons que la section efficace d'ionisation σ_I est donnée en fonction de la section efficace de production de rayonnement-X σ_X , par :

$$\sigma_I = \frac{\sigma_X}{\omega_K}$$

En ce qui concerne le calcul des sections efficaces d'ionisation théoriques : (Ch.I, p.41)

1) approximation semi-classique (BEA) _

Nous avons vu que la connaissance des sections efficaces d'un seul élément permet d'obtenir celles de tous les autres au moyen de la relation :

$$\sigma_a(E_1) = \left(\frac{U_b}{U_a} \right)^2 \sigma_b \left(\frac{U_b}{U_a} E_1 \right)$$

Les calculs ayant été effectués par GARCIA /GA70/ pour le Magnésium ($U = 1.305$ keV), nous avons écrit un programme de calcul numérique permettant d'obtenir par interpolation, les sections efficaces correspondantes à tous les éléments étudiés.

Les énergies d'ionisation adoptées sont :

Ti	4.964 keV
V	5.463
Cr	5.988
Mn	6.537
Fe	7.111
Co	7.709
Ni	8.331
Cu	8.980

2) approximation de Born (PWBA)

La section efficace d'ionisation dans le cas présent a pour expression : (Ch.I, p.25).

$$\sigma_I = 8\pi a_0^2 \frac{Z_1^2}{(Z_2 - 0.3)^4} \frac{f(\eta_K, \theta_K)}{\eta_K}$$

$$\eta_K = \frac{m}{m_1} \frac{E}{(Z_2 - 0.3)^2 R_y}$$

Les fonctions $f(\eta_K, \theta_K)$ ont été tabulées par KHANDEWAL /KA69/ pour différentes valeurs de la constante d'écran $0.64 \leq \theta_K \leq 0.95$ et pour une variation de η_K comprise entre 0.005 et 10.

Le même programme d'interpolation numérique nous a permis d'obtenir les valeurs cherchées ayant adopté pour θ_K , les valeurs suivantes :

Ti	0.77
V	0.77
Cr	0.78
Mn	0.78
Fe	0.78
Co	0.79
Ni	0.79
Cu	0.79

Afin d'analyser les valeurs expérimentales des sections efficaces d'ionisation que nous avons obtenues, nous avons figuré la variation de celles-ci en fonction de l'énergie des protons incidents en représentation semi-logarithmique.

De cette manière, une éventuelle incertitude sur les facteurs correctifs introduits (angles solides, absorption du rayonnement dans la fenêtre en mylar et lors du parcours dans l'air, coefficient de fluorescence ω_K), soit encore tous les termes affectés d'une erreur systématique ne viendra pas modifier l'allure de la courbe représentant les sections efficaces.

Nous avons représenté ces sections efficaces aux figures 12 à 19.

Nous pouvons effectuer d'ores et déjà la constatation suivante :

- la forme semi-classique des sections efficaces d'ionisation reproduit bien l'allure de celle obtenue expérimentalement. Cependant, en valeur absolue et par rapport à nos résultats, les sections efficaces d'ionisation dans le modèle du choc binaire sont systématiquement inférieures de 20 à 30%.
- la forme quantique ne diffère pas, quant à elle, des valeurs expérimentales par un facteur multiplicatif. L'écart important à basse énergie (50%) va en diminuant lorsque l'énergie des protons incidents augmente.

Ceci est essentiellement dû au fait qu'à basse énergie (0.5 MeV), l'interaction coulombienne répulsive entre les protons et les noyaux des atomes de la couche mince n'est pas négligeable, alors qu'elle va en diminuant lorsque la particule incidente devient plus énergétique.

En valeur absolue, ces résultats théoriques tendent vers ceux que nous avons obtenus expérimentalement (sauf dans le cas du Titane et du Chrome où nous avons une différence de 10 à 15%).

La forme quantique donne essentiellement dans la gamme d'énergies des protons où nous avons mesuré, une surestimation de la section efficace d'ionisation.

La consistance de nos résultats peut être examinée sur la figure 20 où nous avons représenté la variation de la section efficace d'ionisation en fonction du numéro atomique Z des éléments étudiés pour différentes valeurs de l'énergie des protons incidents comprise entre 0.5 et 2.0 MeV.

On constate que toutes ces courbes sont continues pour une énergie donnée.

Enfin, à la figure 21, nous avons porté les valeurs des rapports K_{β}/K_{α} en fonction de l'énergie pour tous les éléments étudiés. Les valeurs constantes représentées en tirets, sont celles de SLIVINSKY /5672/ obtenues en créant des trous dans la couche-K au moyen du rayonnement de freinage produit par un tube à rayons-X fortement filtré par du Molybdène. Nos rapports K_{β}/K_{α} sont comparables à ceux obtenus par cette méthode, bien que le stripping des électrons externes par une particule chargée de faible énergie doive fortement les altérer.

Energie (MeV)	σ_{α} (Barns)	σ_{β} (Barns)	$\frac{\sigma_{\beta}}{\sigma_{\alpha}}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\frac{exp}{\sigma_I^{BEA}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\frac{exp}{\sigma_I^{PWBA}}$
0.4	4.1	0.54	0.132	4.6	21	18	1.17	33	0.64
0.5	8.3	1.1	0.138	9.4	43	36	1.19	62	0.69
0.6	14.4	2.0	0.136	16	74	62	1.19	99	0.75
0.7	22	3.1	0.138	25	114	95	1.20	144	0.79
0.8	33	4.5	0.138	37	169	137	1.23	197	0.86
0.9	43	5.7	0.134	48	219	187	1.17	255	0.86
1.0	56	7.8	0.140	64	288	244	1.18	317	0.91
1.1	70	9.7	0.137	80	361	305	1.18	384	0.94
1.2	86	12.7	0.136	97	440	370	1.19	453	0.97
1.3	99	13.9	0.140	113	510	438	1.16	524	0.97
1.4	117	16.3	0.140	133	602	508	1.19	596	1.01
1.5	139	18.2	0.131	157	713	579	1.23	670	1.06
1.6	160	22	0.137	182	826	639	1.29	743	1.11
1.7	169	25	0.145	194	878	699	1.26	817	1.07
1.8	194	27	0.141	222	1004	762	1.32	890	1.13
1.9	209	30	0.143	238	1079	828	1.30	962	1.12
2.0	225	34	0.150	259	1172	896	1.31	1033	1.13
2.1	239	36	0.149	274	1241	967	1.28	1104	1.12
2.2	263	39	0.149	303	1369	1042	1.31	1173	1.17
2.3	278	42	0.149	320	1448	1123	1.29	1240	1.17

Energie (MeV)	σ_{α} (Barns)	σ_{β} (Barns)	$\frac{\sigma_{\beta}}{\sigma_{\alpha}}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\frac{\text{exp}}{\sigma_I^{\text{BEA}}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\frac{\text{exp}}{\sigma_I^{\text{PWBA}}}$
0.4	2.7	0.35	0.131	3.0	12	11	1.09	21.4	0.56
0.5	5.6	0.72	0.129	6.3	25	22	1.14	40	0.63
0.6	9.8	1.3	0.127	11.1	44	39	1.13	66	0.67
0.7	15.2	2.1	0.135	17.3	68	60	1.13	97	0.70
0.8	23	3.0	0.131	26	102	87	1.17	134	0.76
0.9	31	4.2	0.136	35	140	120	1.17	175	0.80
1.0	40	5.2	0.129	45	179	158	1.13	220	0.81
1.1	51	6.9	0.136	58	230	201	1.14	268	0.86
1.2	62	8.2	0.131	70	279	247	1.13	319	0.87
1.3	77	10.3	0.134	87	346	295	1.17	371	0.93
1.4	88	12.9	0.135	100	398	346	1.15	425	0.94
1.5	104	14.0	0.134	118	467	398	1.17	480	0.97
1.6	119	15.6	0.132	134	533	451	1.18	536	0.99
1.7	130	17.4	0.134	147	585	502	1.17	592	0.99
1.8	150	19.5	0.130	169	671	545	1.23	648	1.04
1.9	160	22	0.135	181	720	591	1.22	704	1.02
2.0	174	23	0.131	197	781	638	1.22	760	1.03
2.1	188	25	0.133	213	846	688	1.23	815	1.04
2.2	192	27	0.139	219	869	739	1.18	869	1.00
2.3	214	30	0.139	244	967	793	1.22	923	1.05

CHROME

 $Z = 24$ $M = 51.996 \text{ g}$ $\omega_K = 0.282$ $\theta_K = 0.78$

Energie (MeV)	σ_α (Barns)	σ_β (Barns)	$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\frac{\text{exp}}{\sigma_I}$ σ_I^{PWBA}
0.4	-	-	-	-	-	6.9	12.8	-
0.5	4.3	0.62	0.145	4.9	17.3	13.8	25	0.69
0.6	7.6	1.1	0.145	8.7	31	24	41	0.76
0.7	12.0	1.8	0.149	13.7	49	39	61	0.80
0.8	18.3	2.6	0.141	20.9	74	56	85	0.87
0.9	24	3.4	0.144	27	96	78	113	0.85
1.0	31	4.5	0.146	36	126	104	143	0.88
1.1	41	5.9	0.145	47	165	133	177	0.93
1.2	49	6.9	0.141	55	197	165	213	0.92
1.3	59	9.0	0.152	68	241	200	250	0.96
1.4	71	10.5	0.147	82	290	237	289	1.00
1.5	83	11.4	0.137	94	334	275	329	1.02
1.6	94	13.8	0.147	108	382	314	370	1.03
1.7	108	15.4	0.142	124	438	354	411	1.07
1.8	119	16.5	0.139	135	479	394	453	1.06
1.9	130	19	0.146	149	527	429	495	1.07
2.0	146	21	0.145	167	592	463	537	1.10
2.1	154	24	0.155	177	629	498	578	1.09
2.2	172	26	0.148	198	700	534	620	1.13
2.3	-	-	-	-	-	572	661	-

MANGANESE

 $Z = 25$ $M = 54.938 \text{ g}$ $\omega_K = 0.314$ $\theta_K = 0.78$

Energie (MeV)	σ_α (Barns)	σ_β (Barns)	$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\frac{\text{exp}}{\sigma_I^{\text{BEA}}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\frac{\text{exp}}{\sigma_I^{\text{PWBA}}}$
0.4	1.3	0.16	0.123	1.55	4.6	4.4	1.05	8.4	0.55
0.5	2.8	0.36	0.128	3.2	10.1	8.7	1.16	16.4	0.62
0.6	5.0	0.68	0.135	5.7	18.1	15.6	1.16	28/	0.65
0.7	8.1	1.1	0.136	9.3	30	25	1.20	42	0.71
0.8	13	1.8	0.137	14.5	46	36	1.28	59	0.78
0.9	17	2.4	0.136	19.8	63	51	1.24	79	0.80
1.0	23	3.2	0.140	26	83	68	1.22	101	0.82
1.1	30	4.0	0.134	34	108	87	1.24	125	0.86
1.2	37	4.9	0.134	41	132	111	1.19	152	0.87
1.3	45	6.0	0.132	51	163	136	1.20	179	0.91
1.4	53	7.2	0.134	60	193	163	1.18	208	0.93
1.5	61	8.2	0.135	69	220	190	1.16	239	0.92
1.6	72	9.5	0.131	82	260	219	1.19	270	0.96
1.7	83	10.7	0.129	93	298	249	1.20	301	0.99
1.8	94	12.5	0.134	106	338	280	1.21	333	1.02
1.9	106	13.7	0.130	119	380	310	1.23	366	1.04
2.0	117	15.6	0.133	133	422	342	1.23	398	1.06
2.1	123	17.1	0.138	140	447	367	1.22	431	1.04
2.2	141	18.6	0.132	159	508	397	1.28	463	1.10
2.3	151	202	0.134	171	546	420	1.30	496	1.10

Energie (MeV)	σ_α (Barns)	σ_β (Barns)	$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\sigma_I^{\text{exp}}/\sigma_I^{\text{BEA}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\sigma_I^{\text{exp}}/\sigma_I^{\text{PWBA}}$
0.4	1.1	0.14	0.127	1.24	3.6	2.9	1.24	5.6	0.64
0.5	2.0	0.26	0.129	2.3	6.7	5.7	1.18	11.1	0.60
0.6	3.7	0.49	0.132	4.2	12.3	10.1	1.22	18.8	0.65
0.7	5.9	0.82	0.139	6.7	19.7	16.4	1.20	29	0.68
0.8	9.3	1.2	0.129	10.5	31	25	1.24	41	0.76
0.9	12.3	1.6	0.129	13.9	41	34	1.21	55	0.75
1.0	16.5	2.2	0.134	18.7	55	46	1.20	72	0.76
1.1	22	2.8	0.128	25	73	59	1.24	89	0.82
1.2	28	3.7	0.132	31	92	76	1.24	109	0.84
1.3	34	4.5	0.131	39	114	93	1.23	130	0.88
1.4	41	5.3	0.128	47	137	112	1.22	151	0.91
1.5	48	6.4	0.133	54	158	133	1.19	174	0.91
1.6	54	7.0	0.129	61	178	154	1.16	198	0.90
1.7	62	8.1	0.130	70	205	176	1.16	222	0.92
1.8	72	9.4	0.130	82	239	199	1.20	248	0.96
1.9	82	10.8	0.132	93	270	222	1.22	271	1.00
2.0	87	11.6	0.133	99	290	246	1.17	297	0.98
2.1	98	12.9	0.132	111	325	270	1.20	323	1.01
2.2	107	13.7	0.128	120	352	293	1.20	349	1.01
2.3	113	14.7	0.130	128	373	313	1.19	375	0.99

COBALT

Z = 27

M = 58.9332 g

 $\omega_K = 0.381$ $\theta_K = 0.79$

Energie (MeV)	σ_α (Barns)	σ_β (Barns)	$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\sigma_I^{\text{exp}/\sigma_I^{\text{BEA}}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\sigma_I^{\text{exp}/\sigma_I^{\text{PWBA}}}$
0.4	-	-	-	-	-	1.9	-	3.5	-
0.5	1.7	0.23	0.137	1.9	5.0	3.8	1.32	7.0	0.71
0.6	3.1	0.42	0.136	3.5	9.2	6.6	1.39	12.0	0.77
0.7	5.1	0.65	0.128	5.7	15.1	10.9	1.39	18.7	0.81
0.8	8.2	1.05	0.129	9.2	23	16.4	1.43	27	0.85
0.9	10.8	1.3	0.125	12.1	32	23	1.39	37	0.86
1.0	14.7	1.9	0.130	16.6	44	31	1.41	48	0.92
1.1	18.6	2.4	0.126	21	55	41	1.34	60	0.92
1.2	23	3.1	0.134	26	68	52	1.31	74	0.92
1.3	28	3.7	0.131	32	85	64	1.33	89	0.96
1.4	35	4.2	0.121	39	102	78	1.31	104	0.98
1.5	40	4.9	0.123	45	117	93	1.25	121	0.97
1.6	46	5.6	0.120	52	136	109	1.25	138	0.99
1.7	52	6.9	0.132	59	156	125	1.25	156	1.00
1.8	59	7.9	0.134	67	177	142	1.25	175	1.01
1.9	71	9.0	0.127	80	210	160	1.31	213	0.99
2.0	76	9.8	0.129	86	226	178	1.27	232	0.97
2.1	84	11.5	0.136	96	251	197	1.27	252	1.00
2.2	91	12.1	0.133	103	270	216	1.27	271	1.00
2.3	97	13.3	0.137	110	289	234	1.24	291	0.99

NICKEL

Z = 28

M = 58.71 g

 $\omega_K = 0.414$ $\theta_K = 79$

Energie (MeV)	σ_α (Barns)	σ_β (Barns)	$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\frac{\sigma_I^{\text{exp}}}{\sigma_I^{\text{BEA}}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\frac{\sigma_I^{\text{exp}}}{\sigma_I^{\text{PWBA}}}$
0.4	-	-	-	-	-	1.2	-	2.4	-
0.5	1.3	0.18	0.137	1.5	3.6	2.6	1.38	4.8	0.75
0.6	2.3	0.33	0.126	2.6	6.4	4.5	1.42	8.4	0.76
0.7	3.8	0.60	0.139	4.3	10.4	7.3	1.42	13.1	0.79
0.8	5.4	0.90	0.143	6.2	15.0	11.1	1.35	19.0	0.79
0.9	7.3	1.1	0.133	8.3	20	15.8	1.27	26	0.77
1.0	10.2	1.7	0.142	11.6	28	22	1.27	34	0.82
1.1	13.5	2.0	0.133	15.3	37	28	1.32	44	0.84
1.2	16.0	2.6	0.141	18.2	44	36	1.22	54	0.81
1.3	21	3.4	0.140	24	57	44	1.30	65	0.88
1.4	24	3.9	0.143	27	66	54	1.22	77	0.86
1.5	31	4.9	0.141	35	85	65	1.31	89	0.96
1.6	36	5.6	0.136	41	100	77	1.30	103	0.97
1.7	41	6.4	0.137	47	114	89	1.28	116	0.98
1.8	47	7.3	0.137	53	127	102	1.25	130	0.98
1.9	51	7.9	0.136	58	140	116	1.21	145	0.97
2.0	60	9.3	0.137	68	164	129	1.27	160	1.03
2.1	68	10.7	0.139	77	187	144	1.30	175	1.07
2.2	-	-	-	-	-	158	-	191	-
2.3	-	-	-	-	-	173	-	207	-

CUIVRE

Z = 29 M = 63.54 g $\omega_K = 0.444$ $\theta_K = 0.79$

Energie (MeV)	σ_α (Barns)	σ_β (Barns)	$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha}$	$\sigma_{\alpha+\beta}$ (Barns)	σ_I^{exp} (Barns)	σ_I^{BEA} (Barns)	$\frac{exp}{\sigma_I^{BEA}}$	σ_I^{PWBA} (Barns)	$\frac{exp}{\sigma_I^{PWBA}}$
0.4	-	-	-	-	-	X 0.79	-	1.6	-
0.5	0.79	0.10	0.127	0.9	2.0	1.7	1.18	3.3	0.61
0.6	1.6	0.20	0.127	1.8	4.0	3.1	1.29	5.9	0.68
0.7	2.6	0.32	0.124	2.9	6.6	4.9	1.35	9.3	0.71
0.8	4.2	0.56	0.135	4.7	10.6	7.6	1.39	13.6	0.78
0.9	5.7	0.75	0.133	6.4	14.4	10.9	1.32	18.7	0.77
1.0	7.7	1.01	0.131	8.7	19.7	14.9	1.32	25	0.79
1.1	10.3	1.3	0.130	11.6	26	19.6	1.33	32	0.81
1.2	12.8	1.7	0.130	14.4	33	25	1.32	39	0.85
1.3	16.1	2.1	0.132	18.2	41	31	1.32	48	0.85
1.4	19.8	2.6	0.130	22	50	38	1.32	57	0.88
1.5	23	3.1	0.137	26	58	46	1.26	66	0.88
1.6	28	3.7	0.131	32	72	55	1.31	74	0.97
1.7	32	4.1	0.131	36	80	64	1.25	87	0.92
1.8	37	4.9	0.133	41	93	74	1.26	98	0.95
1.9	42	5.4	0.129	48	107	84	1.27	109	0.98
2.0	47	5.9	0.124	53	120	94	1.28	121	0.99
2.1	51	6.3	0.124	57	129	105	1.23	133	0.97
2.2	54	6.7	0.124	60	136	116	1.17	145	0.94
2.3	59	7.5	0.128	66	149	128	1.16	157	0.95

CONCLUSIONS.

Après avoir effectué un rappel des deux modèles théoriques disponibles permettant de donner une formulation des sections efficaces de production de rayonnement X_K consécutif au bombardement par des particules chargées, à savoir :

- le modèle quantique (PWBA) basé sur l'approximation de Born et la description en ondes planes des ions incidents (l'effet de l'interaction coulombienne entre les particules incidentes et les noyaux des atomes des éléments étudiés n'étant pas considéré).
- le modèle semi-classique (BEA) basé sur la description classique de l'interaction entre l'ion incident et l'électron atomique (l'électron atomique étant supposé avoir une distribution isotrope des vitesses dans le laboratoire, et le choc conservant la valeur du module de la différence des vitesses des deux particules).

Nous avons mesuré les sections efficaces de production de rayonnement-X (K_α , K_β et $K_\alpha + K_\beta$) consécutif au bombardement par des protons d'énergies incidentes comprises entre 0.4 et 2.3 MeV par pas de 100 keVn sur des éléments moyens : Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu et en avons déduit la variation du rapport K_β / K_α en fonction de l'énergie.

Enfin, nous avons comparé les sections efficaces d'ionisations que nous avons obtenues par nos mesures à celles données par les deux modèles décrits précédemment.

Il en résulte que la description semi-classique (BEA) reproduit qualitativement bien l'allure générale des sections efficaces alors que quantitativement et en valeur absolue les quantités théoriques sont systématiquement inférieures de 20%.

La description quantique diffère fort du point de vue qualitatif de celle obtenue expérimentalement surtout à basses énergies y tendant cependant, en valeur absolue et quantitativement, par surestimation lorsque les protons deviennent plus énergétiques.

Les précisions sur les quantités expérimentales obtenues sont les suivantes :

- sections efficaces K_{α} : 12 %
- sections efficaces K_{β} : 15 %
- rapports K_{β}/K_{α} : 7 %
- sections efficaces $K_{\alpha} + K_{\beta}$: 12 %
- sections efficaces d'ionisation : 17 %

Il est, d'autre part, assez difficile d'obtenir des précisions beaucoup plus grandes de celles que nous avons estimées, les erreurs intervenant dans l'expression des sections efficaces étant essentiellement de caractère systématique.

APPENDICE.

SOLUTION AU PROBLEME DES INTERFERENCES DANS LES REACTIONS (p,X).

I. Introduction.

Un spectre de rayonnement X obtenue à l'aide de détecteurs à semi-conducteur ne peut-être considéré comme le "vrai" spectre par suite de la résolution de l'ensemble de détection.

Une vraie forme peut être obtenue en résolvant une intégrale de Fredholm de première espèce ayant pour noyau "la fonction de réponse du détecteur".

Nous supposons donc que l'ensemble de l'appareillage de détection peut être décrit par "une fonction" $R(x,y,\sigma(y))$ qui représente la probabilité qu'une observable "y" soit considérée par le détecteur comme étant l'observable "x". Si la vraie distribution est décrite au moyen d'un vecteur $T(y)$, la détection donnera la distribution expérimentale $S(x)$ telle que :

$$S(x) = \int_a^b R[x,y,\sigma(y)] T(y) dy$$

x et y représentent des variables aléatoires indépendantes appartenant au pavé x,y.

La fonction de résolution R est assurée avoir "un facteur de résolution" (ou "résolution") σ pouvant varier avec y, ce facteur pouvant être par exemple, l'écart-quadratique moyen de la distribution.

Excepté quelques cas particuliers, il est difficile, voire même impossible d'améliorer la résolution sans sacrifier les informations que l'on pourrait obtenir de l'expérience.

Il est très important de voir jusqu'à quel point la distorsion due à la résolution peut être réduite en résolvant l'équation intégrale précédente lorsque la fonction de réponse et la distribution sont connues expérimentalement.

L'exactitude d'une telle solution dépend du caractère statistique des données expérimentales et de la mesure de la fonction de résolution.

La fonction de réponse est supposée normalisée c.à.d. que les distributions satisfont à la condition *à-priori* d'égalité des aires des distributions "vraies" et "idéales".

Ce type de fonctions de résolution est une assez bonne représentation d'un bon nombre de processus statistiques si $\sigma(y)$ est convenablement choisi.

D'autre part, il faut effectuer un choix de fonctions de réponse.

Il existe bon nombre de méthodes pour résoudre l'équation intégrale.

Certaines méthodes (méthodes itératives) utilisent $S(x)$ comme première approximation de $T(y)$, puis des solutions approchées sont obtenues par itération. Cette méthode est peu satisfaisante pour des données ayant peu de statistique en ce sens que la première approximation n'est pas suffisamment sûre pour permettre une convergence rapide du processus itératif. C'est pourquoi, en elles-mêmes, ces méthodes ne sont pas recommandables dans le traitement de nos informations.

Un problème universellement rencontré dans la solution de l'équation intégrale est l'apparition d'oscillations de "grandes fréquences" et d'amplitudes relativement élevées dans la solution. De telles solutions peuvent être de "bonnes solutions" mathématiques de l'équation intégrale en ce sens que lorsqu'elles sont substituées dans cette dernière, elles redonnent la distribution expérimentale même si du point de vue physique, cette solution n'a pas de signification (valeurs négatives du comptage).

D'autre part, l'existence d'une solution n'implique pas son unicité.

Si $T_1(y)$ est solution, alors $T_2(y)$ sera aussi solution si

$$T_2(y) = T_1(y) + \phi(y)$$

et si

$$\int_a^b R[x, y, \sigma(y)] \phi(y) dy = 0 \quad \forall x$$

La fonction de réponse $R(x, y, \sigma(y))$ étant positive pour tout x et y vu sa définition probabiliste, intuitivement si $\phi(y)$ existe, on imaginera qu'elle doit avoir un caractère oscillant.

On peut essayer de donner une condition supplémentaire comme la non-négativité de $T(y)$ et ceci, introduit la programmation linéaire bien connue en recherche opérationnelle.

La technique la plus populaire est la méthode des différences finies ou "analyse multigroupe".

Ceci revient à remplacer l'équation intégrale par un système matriciel au moyen d'une formule de quadrature plus ou moins évoluée. On obtient alors une équation matricielle.

Le problème revient donc à inverser une matrice dont la dimension est arbitraire et dépend du découpage. Si elle n'est pas singulière, il existera par suite même des formules de quadrature, un vecteur parasite dû à l'erreur inhérente à la méthode qui altèrera la solution.

Notons que la représentation matricielle sera exacte si $T(y)$ peut être représentée par une somme de fonctions deltas centrées au milieu de chaque canal.

Cependant, pour des raisons physiques, nous postulons l'existence et l'unicité d'un opérateur inverse de l'opérateur intégral R linéaire et continu, D non nécessairement continu d'ailleurs.

2. Choix de fonctions de réponse.

Nous avons vu que la distribution expérimentale $S(x)$ est donnée comme résultant de l'action d'une fonction de réponse $R(x,y,\sigma(y))$ sur la vraie distribution $T(y)$, que l'on notera formellement.

$$S = RT$$

Nous savons que les transitions-X ont une faible largeur Γ_X et que nous pouvons les assimiler à des fonctions deltas.

Dans ce cas, le spectre expérimental sera une somme interférente ou non des fonctions de réponse pondérées par l'amplitude la transition.

Il suffit donc en pratique d'obtenir un pic isolé et d'en déterminer une expression analytique satisfaisante. A priori, vu le caractère statistique de l'interaction des quanta-X avec le cristal du détecteur et des divers phénomènes qui y interviennent (effet photoélectrique, effet compton, création de paires), une bonne description sera celle de considérer les pics comme ayant des allures gaussiennes (ou lorentziennes).

Nous avons effectué des mesures comparatives sur des pics isolés en intégrant les pics et en les approximant par des gaussiennes. Il s'avère que les résultats obtenus sont largement satisfaisants et sont inférieurs à la fourchette statistique.

Dans le cas gaussien par exemple, l'amplitude T_i sera obtenue de façon aisée si on se donne la position du maximum et l'écart-type σ , par l'approximation des moindres carrés.

$$\chi^2(T_i) = \sum_k [S_k - \sum_j T_j R_{kj}]^2$$

En minimisant χ^2 par rapport à T_j , on a l'équation matricielle suivante :

$$\sum_i \{ \sum_k R_{ki} R_{kj} \} T_i = \sum_k S_k R_{kj} V_j$$

3. Solution de l'équation intégrale dans le cas d'un noyau gaussien.

Nous allons supposer que "la résolution" ou l'"écart-type" de la distribution est constante dans tout le domaine concerné.

$$S(x) = \int R(x,y) T(y) dy$$

S'il existe une solution à l'équation précédente moyennant la connaissance de $S(x)$ et du noyau $R(x,y)$, nous pouvons postuler l'existence d'une transformation définie par :

$$T(y) = \int D(y,x') S(x') dx'$$

La condition impliquant que ces transformations soient inverses est la suivante :

$$\int R(x,y) D(y,x') dy = \delta(x-x')$$

On supposera que $R(x,y)$ est continu, dérivable et borné et que son inverse $D(y,x)$ existe, qu'il est unique mais non nécessairement continu.

Remarque : Un cas bien connu de telles transformations est la transformée de Fourier où :

$$R(x,y) = e^{ixy}$$

$$D(y,x) = \frac{e^{-ixy}}{2\pi}$$

Nous nous intéresserons au cas particulier où les noyaux $R(x,y)$ sont du type $R(x-y)$ dont l'inverse $D(y,x)$ aura la même propriété: $D(y,x)$ du type $D(y-x)$. $S(x)$ et $T(y)$ seront donc définis comme des produits de convolution.

Nous prendrons comme intervalle $x, y \in (-\infty, \infty)$ ce qui ne nuit pas au côté physique du problème car $T(y)$ et $S(x)$ sont nulles pour x et y négatifs.

Si $\tilde{R}(\omega)$ et $\tilde{D}(\omega)$ sont respectivement les transformées de Fourier de $R(x, 0)$ et $D(x, 0)$ on a :

$$\tilde{R}(\omega) \tilde{D}(\omega) = 1$$

D'où

$$D(y-x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega(y-x)}}{\tilde{R}(\omega)} d\omega$$

Dans le cas d'un noyau gaussien en unités réduites,

$$R(x-y) = \frac{e^{-(x-y)^2}}{\sqrt{\pi}}$$

comme

$$\tilde{R}(\omega) = e^{-\frac{\omega^2}{4}}$$

sachant que

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega u} d\omega = \delta(u)$$

et notant

$$\delta^{(k)}(u) = \frac{d^k}{du^k} \delta(u)$$

on obtient

$$D(y-x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{4^n n!} \delta^{(2n)}(y-x)$$

$\tilde{R}(\omega)$ ayant été remplacé par son développement en série.

$D(y-x)$ satisfait bien à la relation :

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x-y) D(y-x') dy = \delta(x-x')$$

qui se démontre à partir de la connaissance de

$$\delta(x-x') = \frac{e^{-(x-x')^2}}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{4^n n!} H_{2n}(x-x')$$

où $H_k(x)$ sont les polynômes d'Hermite.

Montrons comment peut-on obtenir $T(x)$, connaissant $S(x)$.

$$T(x) = \int_{-\infty}^{\infty} D(x-y) S(y) dy$$

soit en remplaçant $D(x-y)$ par son expression

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta^{(k)}(x-x') dx = (-1)^k f^{(k)}(x')$$

$$T(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{4^n n!} S^{(2n)}(x)$$

On peut montrer, d'autre part, que la solution est bien unique.

Si on désire utiliser non des variables normalisées, mais y inclure explicitement la résolution:

$$T(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \sigma^{2n}}{2^n n!} S^{(2n)}(x)$$

Cependant, bien que l'expression précédente soit rigoureusement la solution du problème, on constate qu'elle n'est pratiquement pas utilisable. Les personnes familiarisées avec les techniques du calcul numérique savent bien que les dérivées d'ordre relativement élevé ne peuvent être obtenues de façon très précise.

En conséquence de quoi nous avons dû élaborer une méthode quelque peu différente qui donne de bien meilleurs résultats.

4. Principes du programme de déconvolution avec optimalisation.

La méthode que nous allons utiliser est la décomposition du spectre expérimental sur une base formée par un ensemble de gaussiennes normalisées. Les coefficients de ces gaussiennes étant obtenues par la méthode des moindres carrés.

La qualité de l'accord entre le calcul théorique et les valeurs expérimentales de la décomposition précédente sera donnée par :

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \left[\frac{s_k^{\text{th}} - s_k^{\text{exp}}}{\Delta s_k^{\text{exp}}} \right]^2$$

où $k_{\max}$ est le nombre de points expérimentaux,

s_k^{th} est une valeur théorique du spectre de rayonnement,

s_k^{exp} est une valeur expérimentale du spectre de rayonnement.

L'expression théorique du spectre de rayonnement dépend essentiellement de paramètres qui sont soit fixés à l'avance, soit à déterminer (position du pic, largeur à mi-hauteur ou résolution, aire du pic).

Δs_k^{exp} est l'erreur expérimentale attachée à la valeur expérimentale s_k^{exp} .

L'optimisation consiste à trouver l'ensemble des paramètres p_j qui minimise la fonction $\chi^2 = f(p_j)$

La recherche de ces paramètres se fera automatiquement à partir de la méthode mise au point à Oak Ridge par PEREY et BUCK (PE65/).

1. Formalisme mathématique.

Supposons que l'optimisation soit effectuée sur $j_{\max}$ paramètres. On part d'un point M et on cherche le point M+1 où

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial p_j} = 0$$

pour chaque paramètre compris entre p_1 et $p_{\max}$. Ceci revient à trouver le minimum de la surface décrite par χ^2 dans un espace à $j_{\max}+1$ dimensions.

On trouve que :

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial p_j} = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{2}{(\Delta S_k^{\text{exp}})^2} \left[S_k^{\text{th}}(M+1) - S_k^{\text{exp}} \right] \frac{\partial S_k^{\text{th}}(M+1)}{\partial p_j} = 0$$

2. Première approximation.

$S_k^{\text{th}}(M+1)$ est développé autour du point $S_k^{\text{th}}(M)$ par la formule de Taylor en se limitant au premier ordre :

$$S_k^{\text{th}}(M+1) = S_k^{\text{th}}(M) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} \frac{\partial S_k^{\text{th}}(M)}{\partial p_j} \delta p_j$$

soit pour $\frac{\partial \chi^2}{\partial p_j} = 0$

$$0 = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{2}{(\Delta S_k^{\text{exp}})^2} \left\{ (S_k^{\text{th}}(M) - S_k^{\text{exp}}) \frac{\partial S_k^{\text{th}}(M+1)}{\partial p_j} + \frac{\partial S_k^{\text{th}}(M+1)}{\partial p_j} \sum_{i=1}^{j_{\max}} \frac{\partial S_k^{\text{th}}(M)}{\partial p_i} \delta p_i \right\}$$

3. Seconde approximation.

On posera que

$$\frac{\partial S_k^{H_{(H+1)}}}{\partial p_j} = \frac{\partial S_k^{H_{(H)}}}{\partial p_j}$$

qui ne sera valable que si la surface engendrée par $\chi^2(p_j)$ varie peu en fonction des paramètres, on obtient :

$$\sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{2}{(\Delta S_k^{\text{exp}})^2} \frac{\partial S_k^{H_{(H)}}}{\partial p_j} \left\{ \sum_{i=1}^{j_{\max}} \frac{\partial S_k^{H_{(H)}}}{\partial p_i} \delta p_i \right\} = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{2}{(\Delta S_k^{\text{exp}})^2} \frac{\partial S_k^{H_{(H)}}}{\partial p_j} (S_k^{\text{exp}} - S_k^{H_{(H)}})$$

Les dérivées se calculent au moyen de n'importe quelle méthode employée en analyse numérique pour une variation des paramètres tel que p_j subisse un accroissement de 0,01. L'expression précédente est un système de $j_{\max}$ équations à $j_{\max}$ inconnues. Les inconnues sont les accroissements δp_i qui s'obtiennent de façon classique.

4. Evolution du calcul.

En se fixant une valeur de départ des paramètres $p_{j,0}$ et pour ne pas atteindre par l'optimisation des valeurs non réalistes, on limite l'accroissement de ces paramètres de telle sorte que la nouvelle valeur soit telle que :

$$p_j = p_{j,0} + z \delta p_j \quad 0 < z \leq 1$$

Si $\phi_{\max} = \max \left\{ \frac{\delta p_j}{p_{j,0}} \right\}$ pour chacun des accroissements obtenus, on doit avoir :

$$\begin{aligned} \phi_{\max} &< 0.2 \\ 0.2 &\leq \phi_{\max} < 0.3 \\ 0.3 &\leq \phi_{\max} < 0.5 \\ 0.5 &\leq \phi_{\max} < 1 \\ 1 &\leq \phi_{\max} \end{aligned}$$

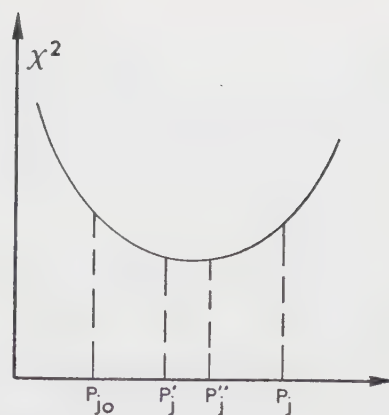
$$z = 1$$

$$z = 0.5$$

$$z = 0.2$$

$$z = 0.1$$

$$z = 0.05$$



Le troisième point correspondant à p'_j est obtenue de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \chi^2(p'_j) &\leq \chi^2(p_{j,0}) & \left\{ \begin{array}{l} z_j = z \\ z'_j = 2z \end{array} \right. & \left\{ \begin{array}{l} p_j = p_{j,0} + z_j \delta p_j \\ p'_j = p_{j,0} + z'_j \delta p_j \end{array} \right. \\ \chi^2(p'_j) &> \chi^2(p_{j,0}) & \left\{ \begin{array}{l} z_j = 0.5z \\ z'_j = z \end{array} \right. & \end{aligned}$$

On calcule ensuite la parabole passant par ces trois points.
Si cette parabole est :

- concave, on en recherche le point minimum qui constituera le nouveau point de départ.
- convexe, alors deux cas peuvent se produire :

$$\begin{aligned} \chi^2(p'_j) &< \chi^2(p_{j,0}) & p''_j &= p_{j,0} + 3z_j \delta p_j \\ \chi^2(p'_j) &\geq \chi^2(p_{j,0}) & p''_j &= p_{j,0} - z_j \delta p_j \end{aligned}$$

Ces données pratiques sont le résultat d'une longue systématique effectuée par MELKANOFF et al /ME 66/ à Oak-Ridge.

Le calcul s'achève en se fixant soit le nombre d'optimisation, soit en se donnant une variation pourcentuelle minimale du x^2 .

5. Application aux réactions (p,X).

Pour notre problème, de nombreux paramètres tels que la position en énergie des pics et la résolution (ou l'écart-type) sont fixés.

Les seules inconnues qui restent sont donc les amplitudes.

Nous avons écrit un programme de dépouillement de spectres en multigaussiennes en langage FORTRAN sur ces bases. Il fut utilisé lors du dépouillement de nos mesures d'excitation et absolues. Dans ce cas, deux gaussiennes étaient suffisantes.

Enfin, ce programme fut utilisé lors du dépouillement de mesures d'analyse d'éléments traces dans des filtres de pollution. Nous l'avons testé sur des filtres dont la concentration en élément était connue et dont nous nous servirons comme standard.

Les résultats obtenus sont excellents et ont fait l'objet d'une publication /B073/.

Nous n'avons pas inclus le listing du programme dans cette thèse, étant assez long et ne présentant pas d'apports spécifiques.

LEGENDE DES FIGURES.

- fig 1 Vue d'ensemble du dispositif expérimental.
- fig 2 Détail de l'enceinte à vide.
- fig 3 Mise en évidence par rétrodiffusion de particules alphas, d'une couche parasite (Ta+Cu) évaporée en sandwich entre le support et la couche mince de Cu. (a) $240 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, (b) $410 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, (c) Cu pur et (d) Ta pur.
- fig 4 Cinématique de retrodiffusion pour des protons de 0.5, 1 et 2 Me sur le Carbone, l'Oxygène, le Titane et le Cuivre.
- fig 5 Schéma de l'électronique relative aux mesures d'excitation.
- fig 6 Schéma de l'électronique relative aux mesures absolues.
- fig 7 Spectre de protons rétrodiffusés à 180° par une couche mince de cuivre ($80 \mu\text{g}/\text{cm}^2$).
- fig 8 Exemple de raies K et K observées par visualisation des valeurs stockées en mémoire de l'ordinateur.
- fig 9 Courbe d'efficiencie calculée pour le détecteur Si(Li) utilisé pour la détection du rayonnement X.
- fig 10 Variation de θ_k en fonction du nombre atomique Z.
- fig 11 Variation de ω_k en fonction du nombre atomique Z.
- fig 12 Sections efficaces d'ionisation de la couche K pour
à 19 les éléments Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni et Cu.
- fig 20 Variation des sections efficaces d'ionisation en fonction du nombre atomique Z, pour différentes valeurs de l'énergie des protons. ($E_p = 0.5$ à 2 Mev)
- fig 21 Variation des rapports K_β/K_α en fonction de l'énergie des protons incidents pour tous les éléments étudiés.

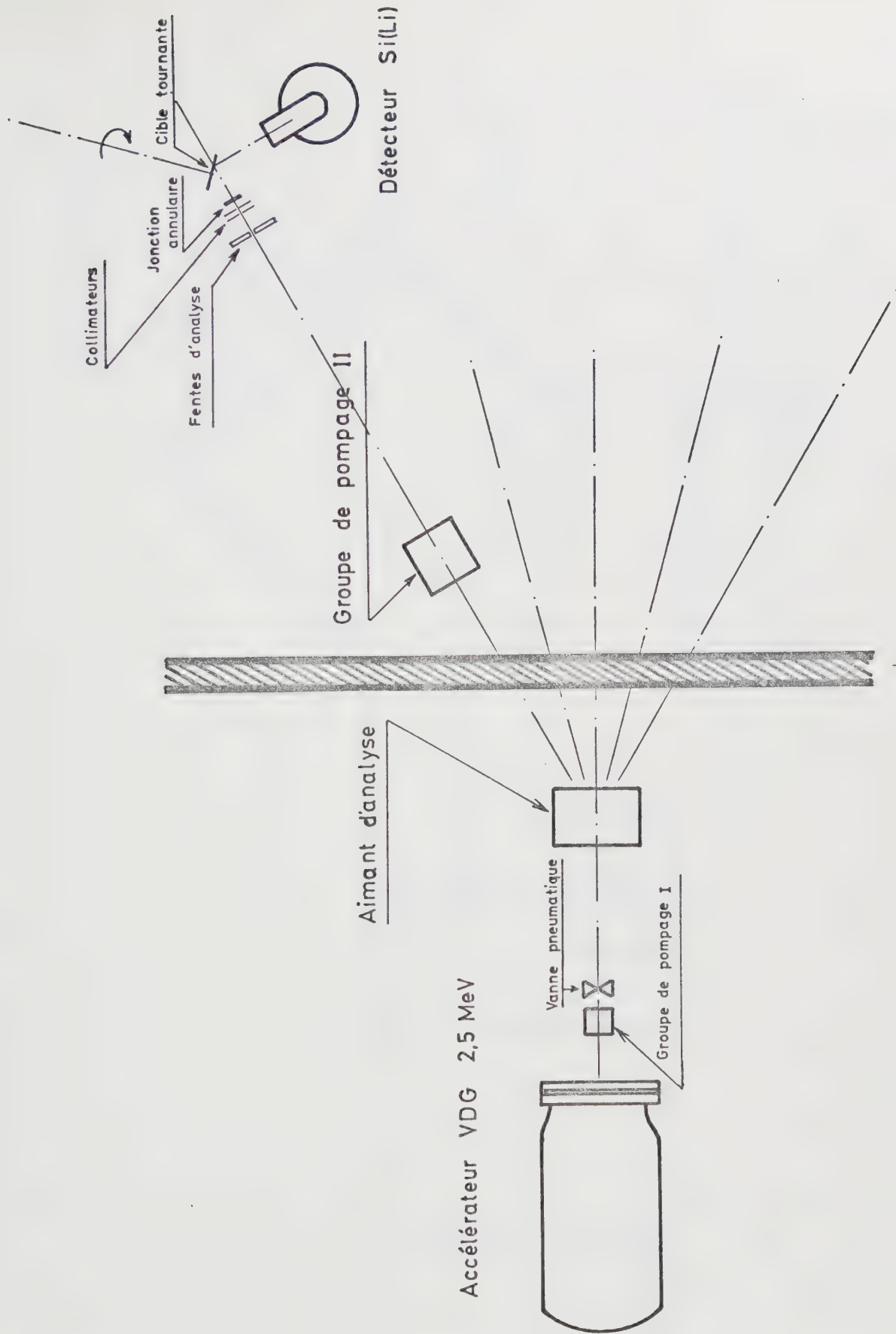


fig 1

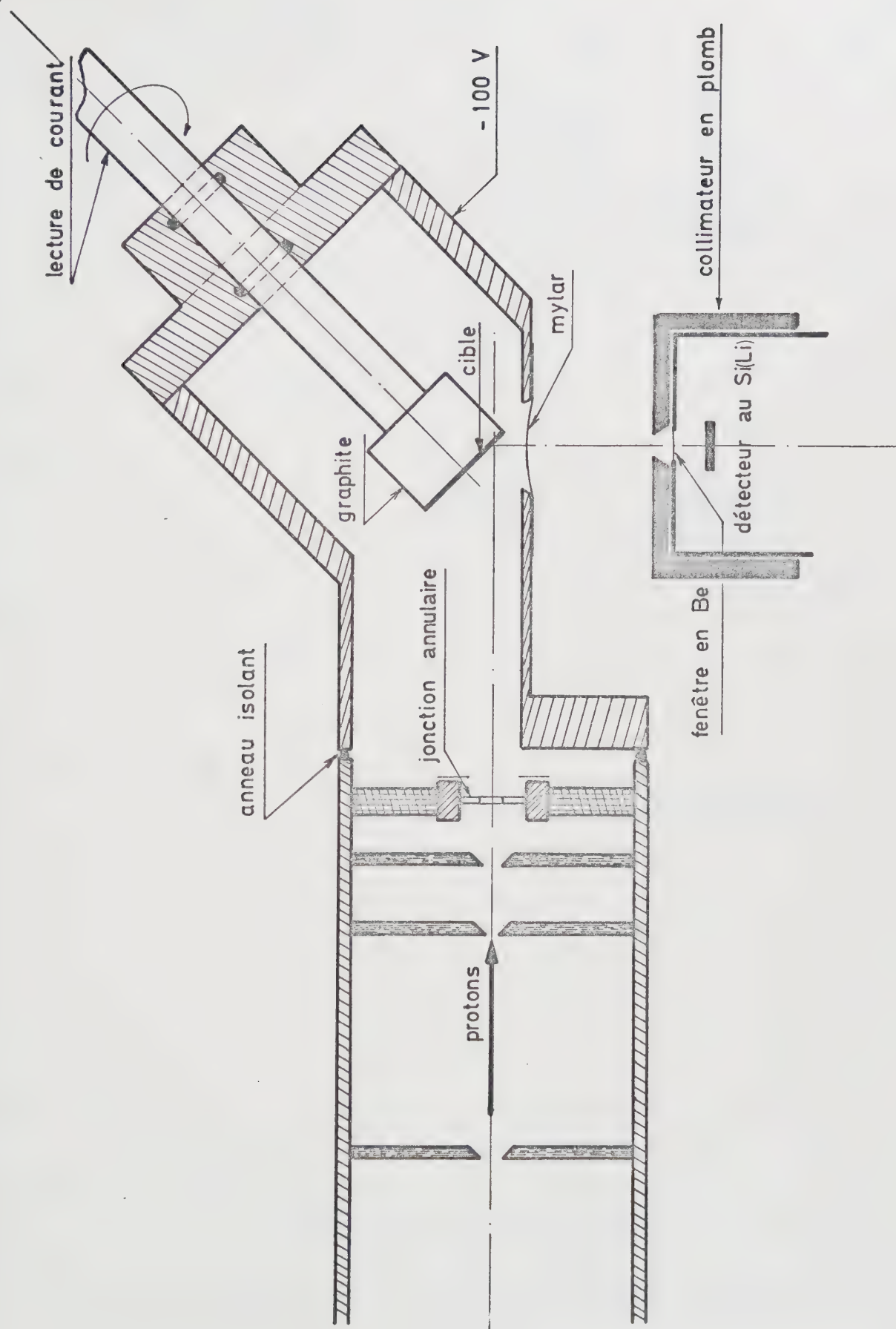


fig 2

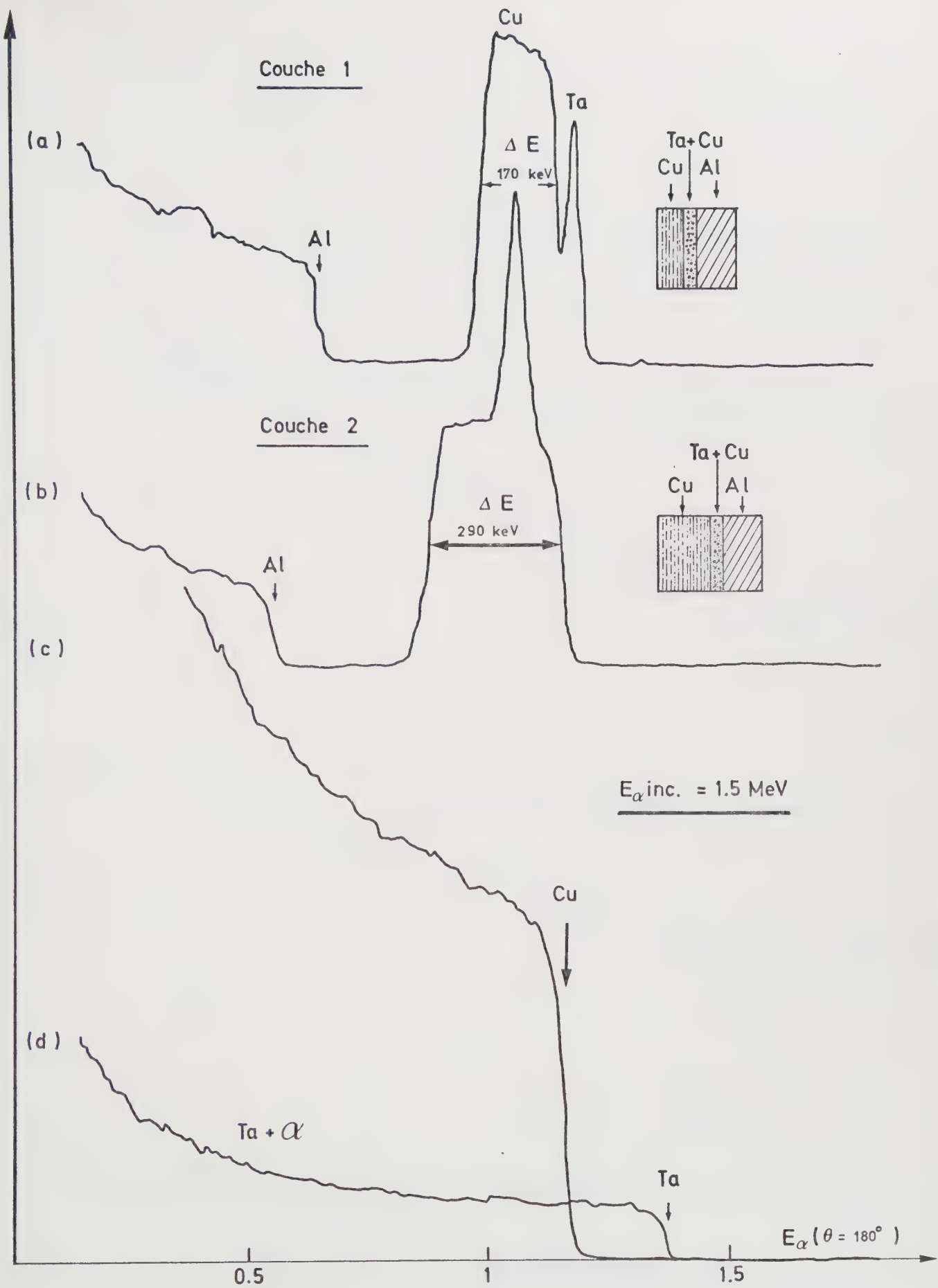


fig 3

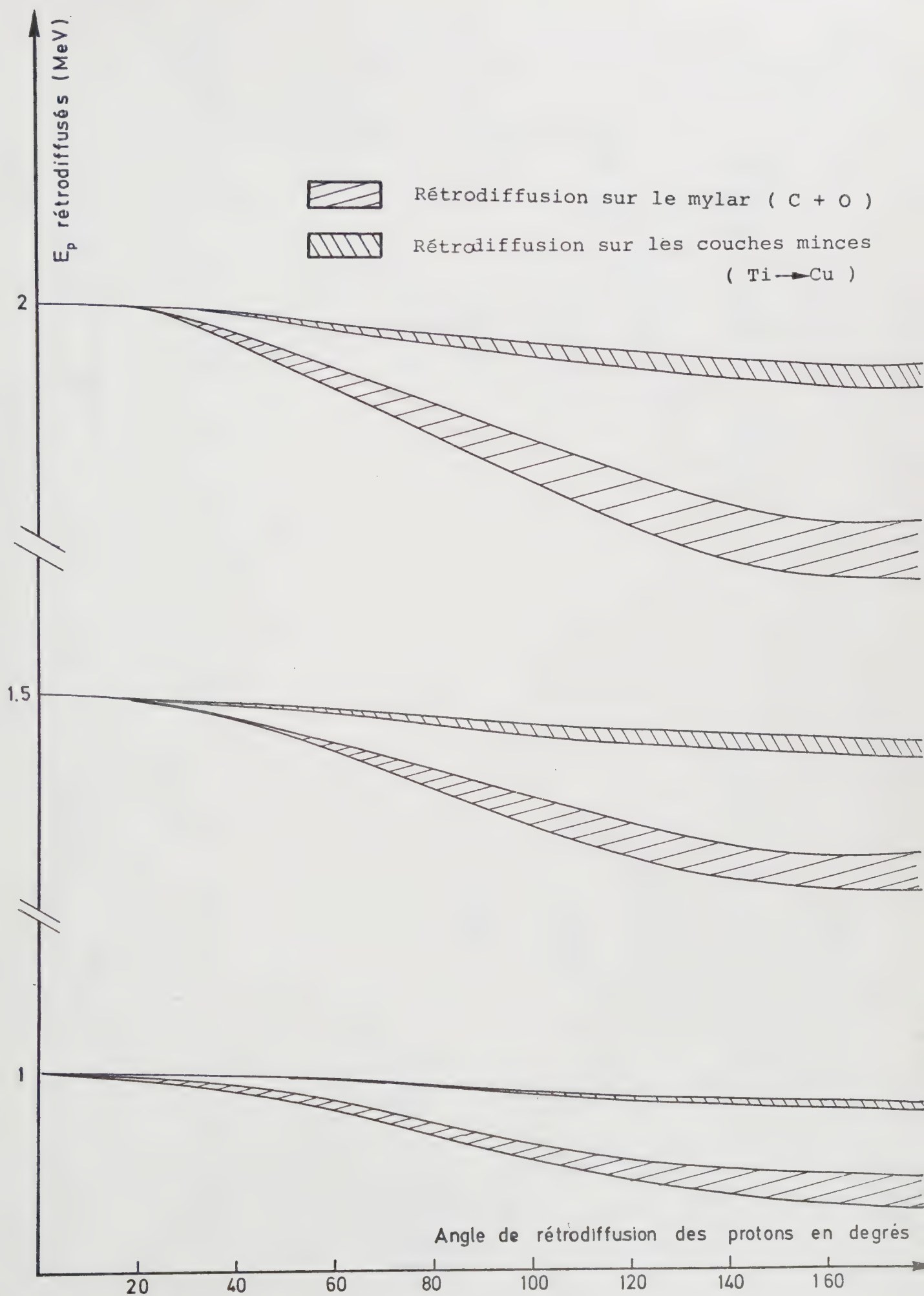


fig 4

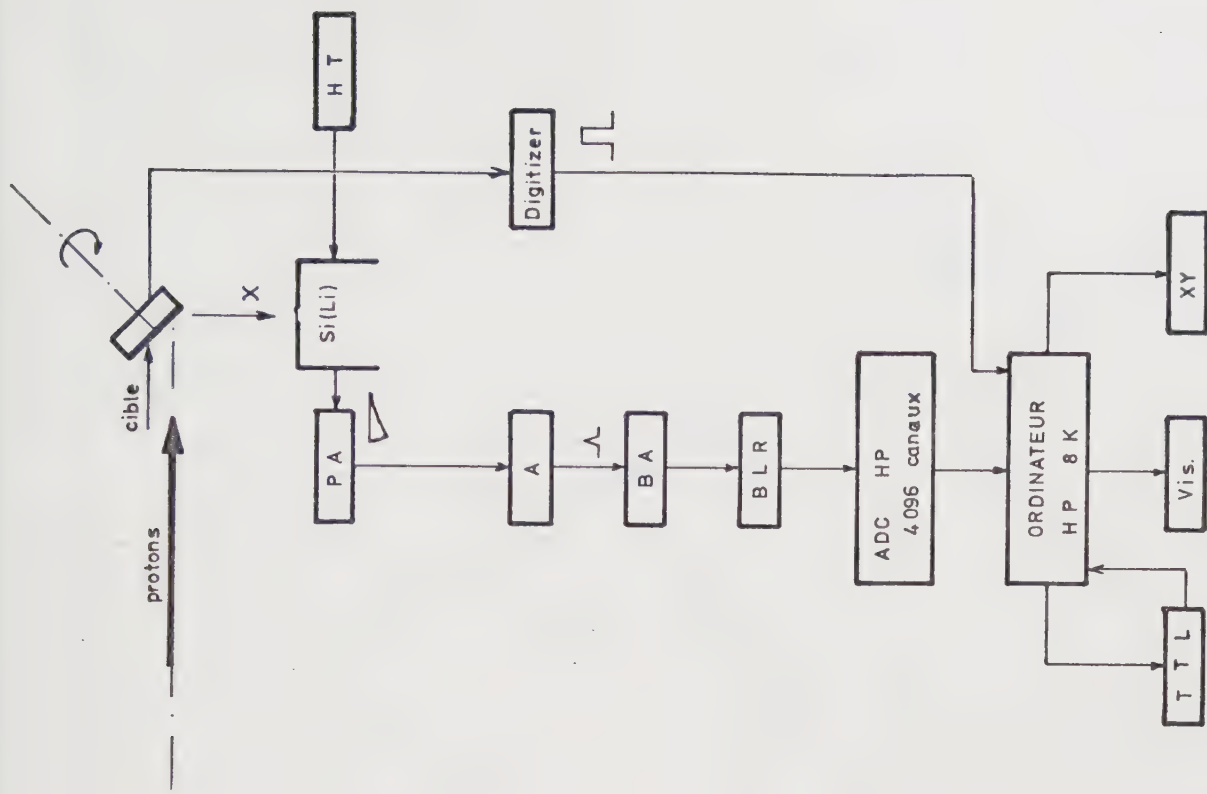


fig 5

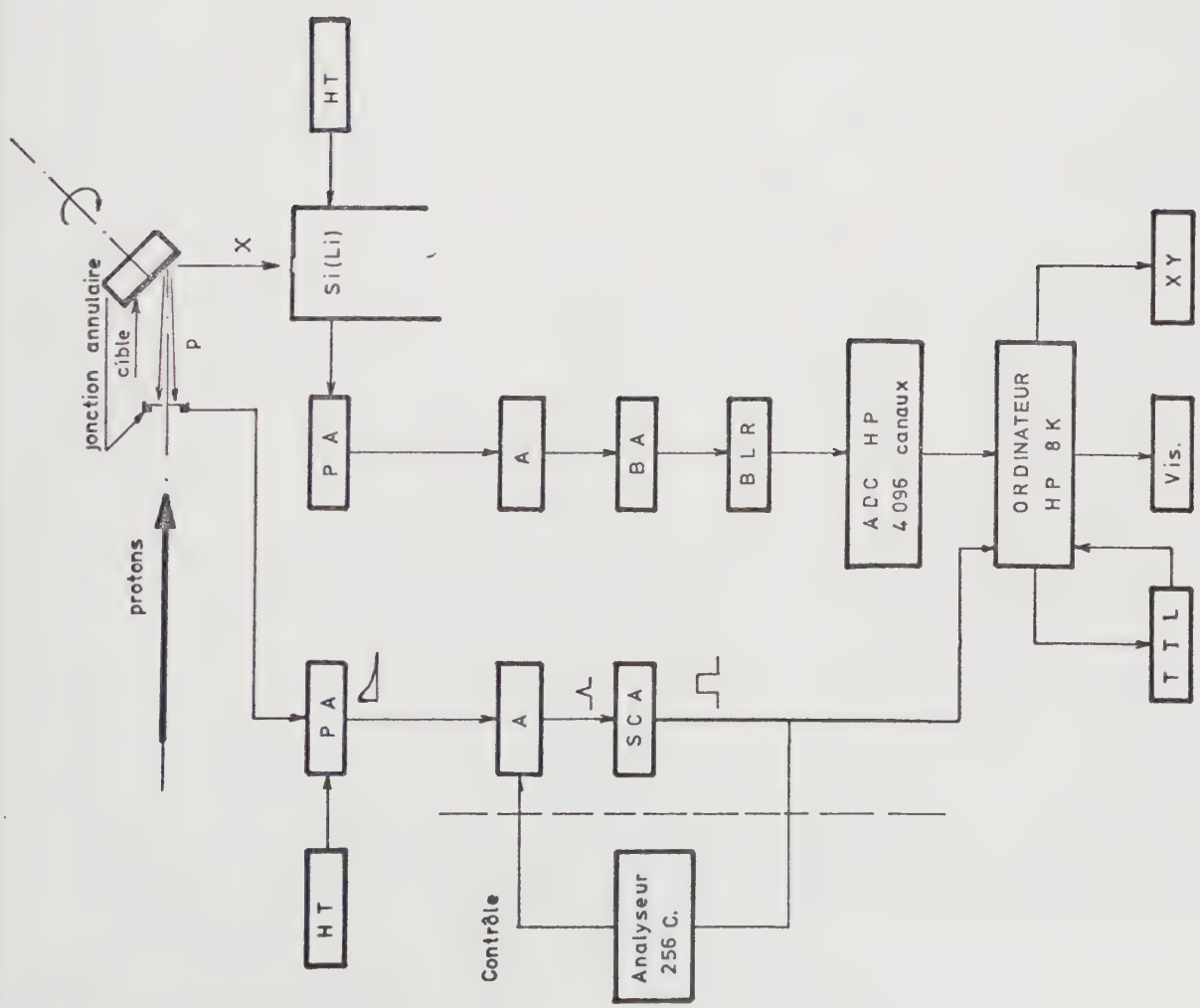


fig 6

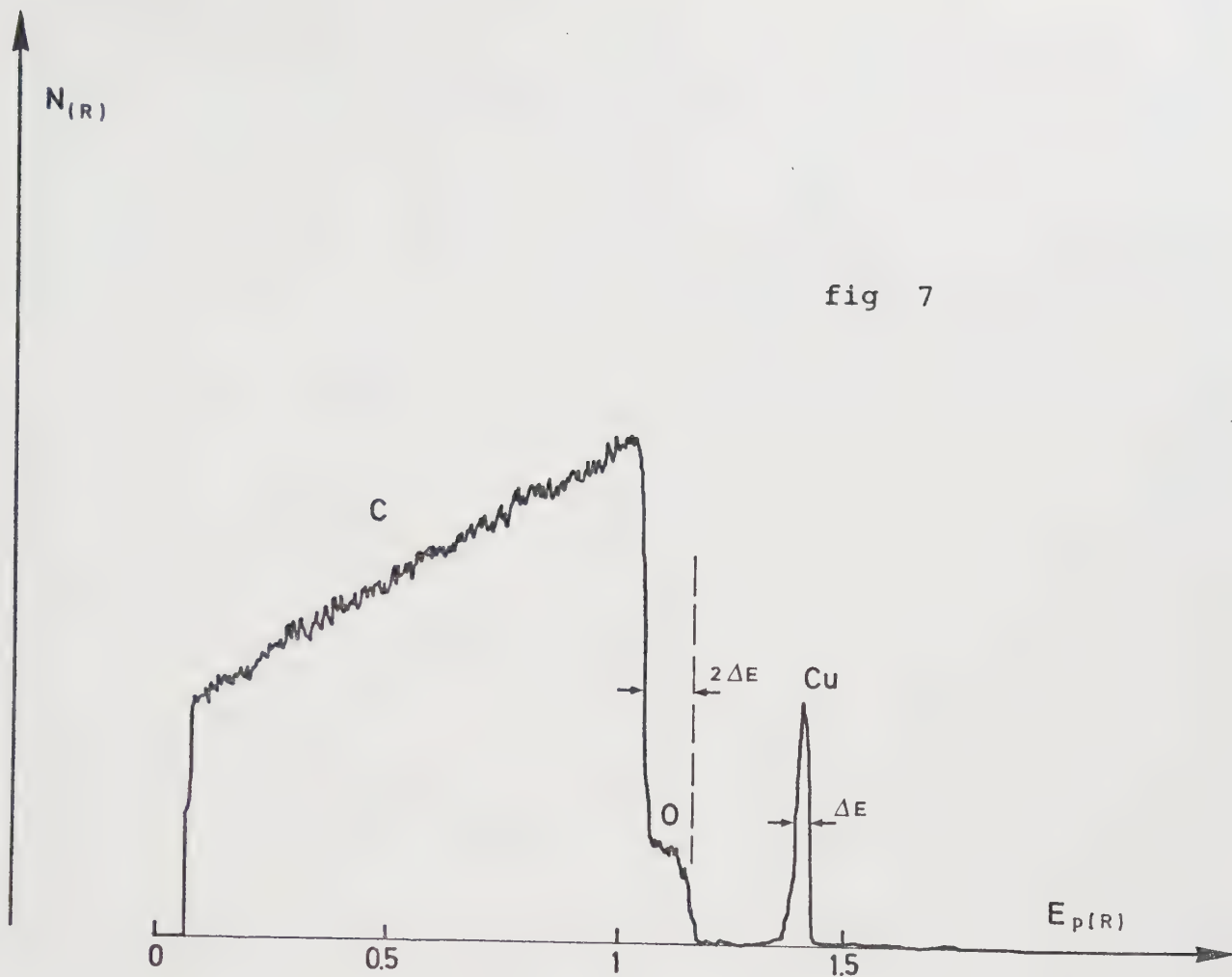


fig 7

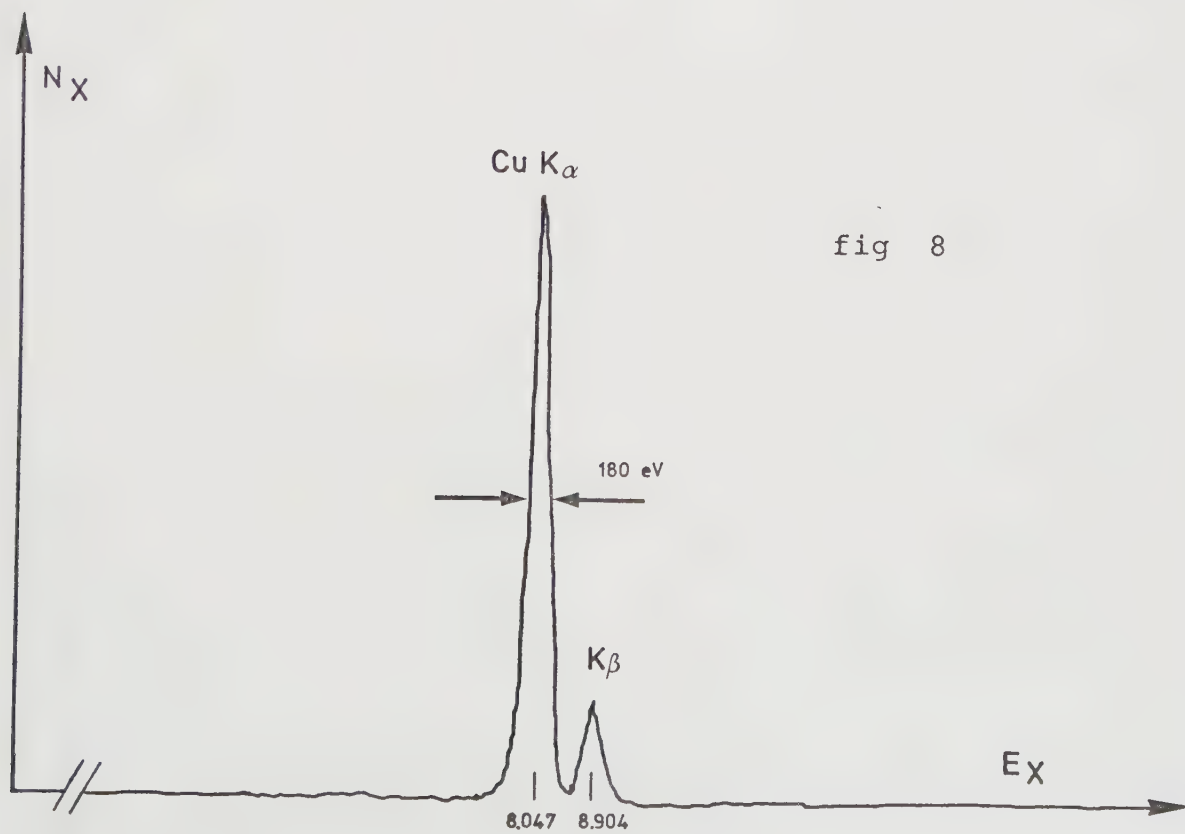


fig 8

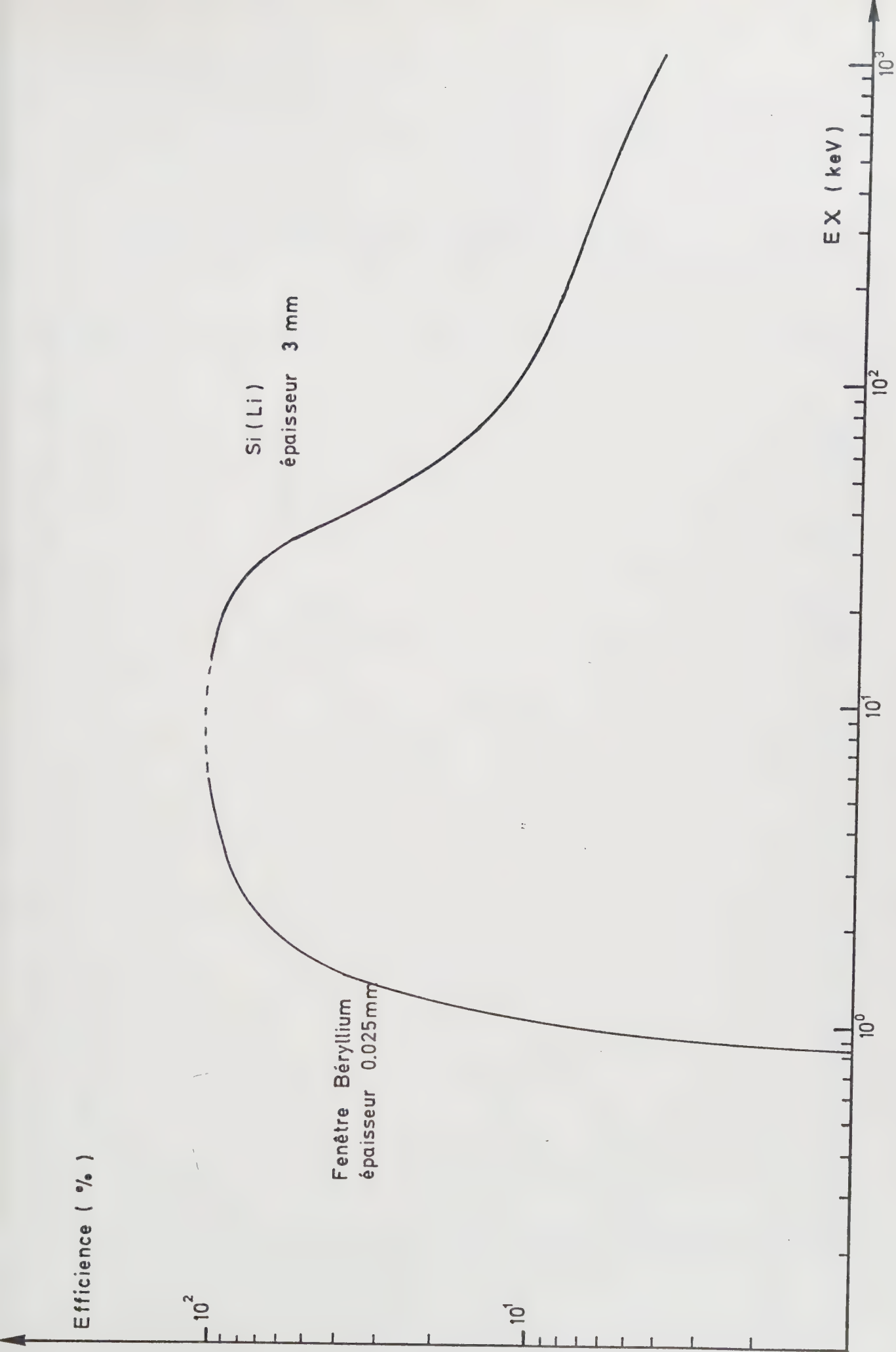


fig 9

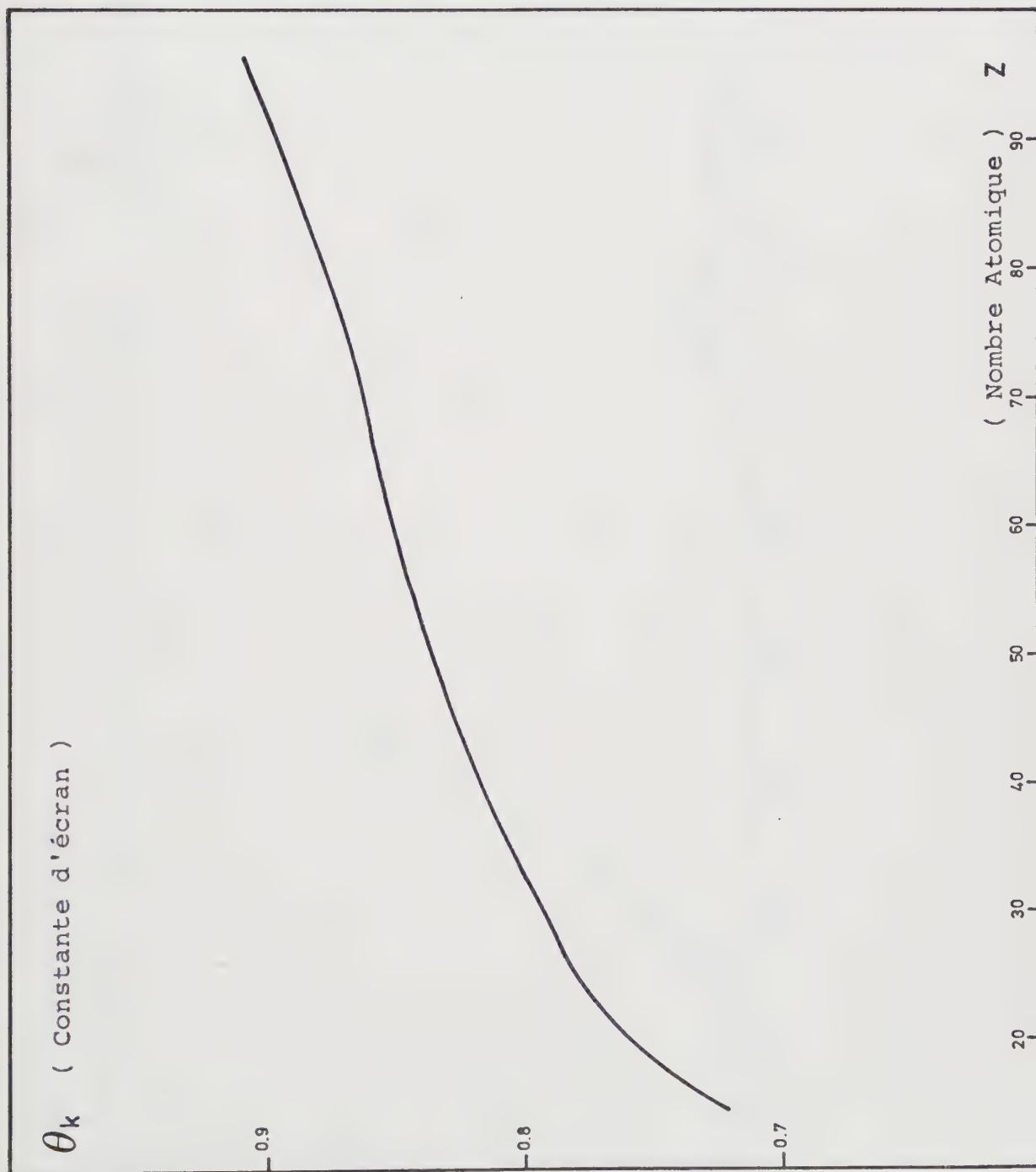


fig 10

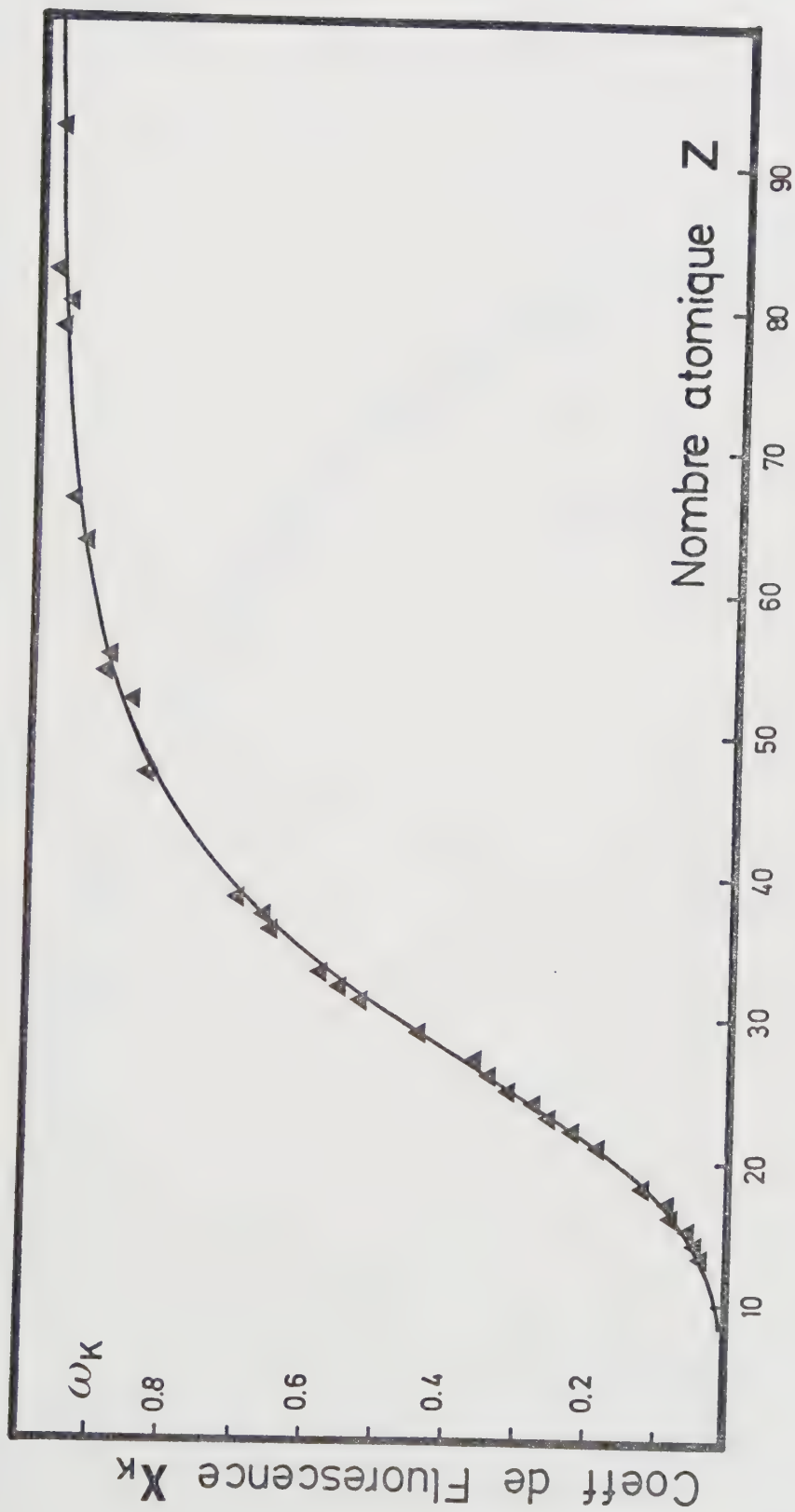


fig 11

TITANE

$Z = 22$

$U = 4.964 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.221$

$\theta_k = 0.77$

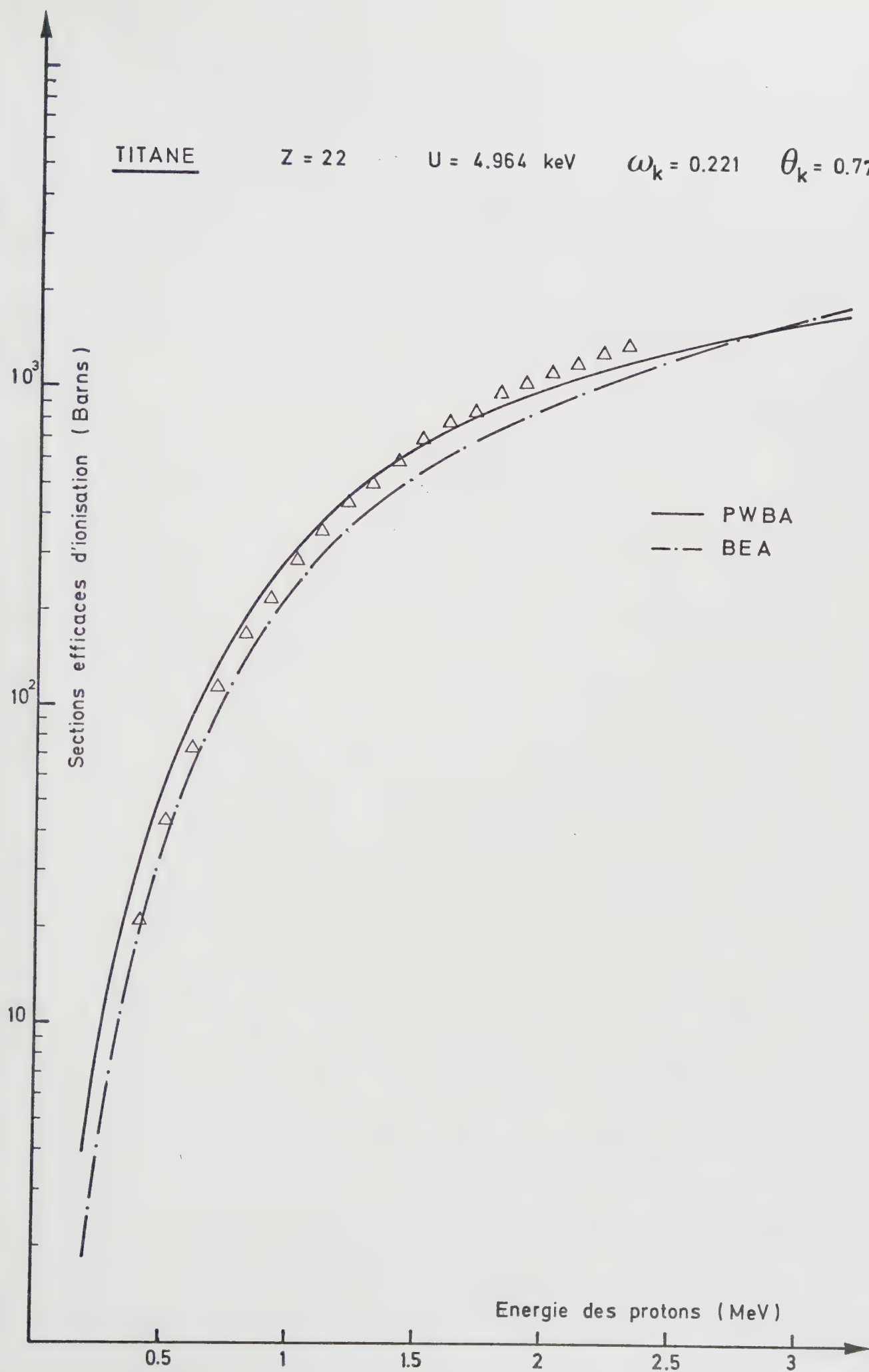


fig 12

VANADIUM

$Z = 23$

$U = 5.463 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.252$

$\theta_k = 0.77$

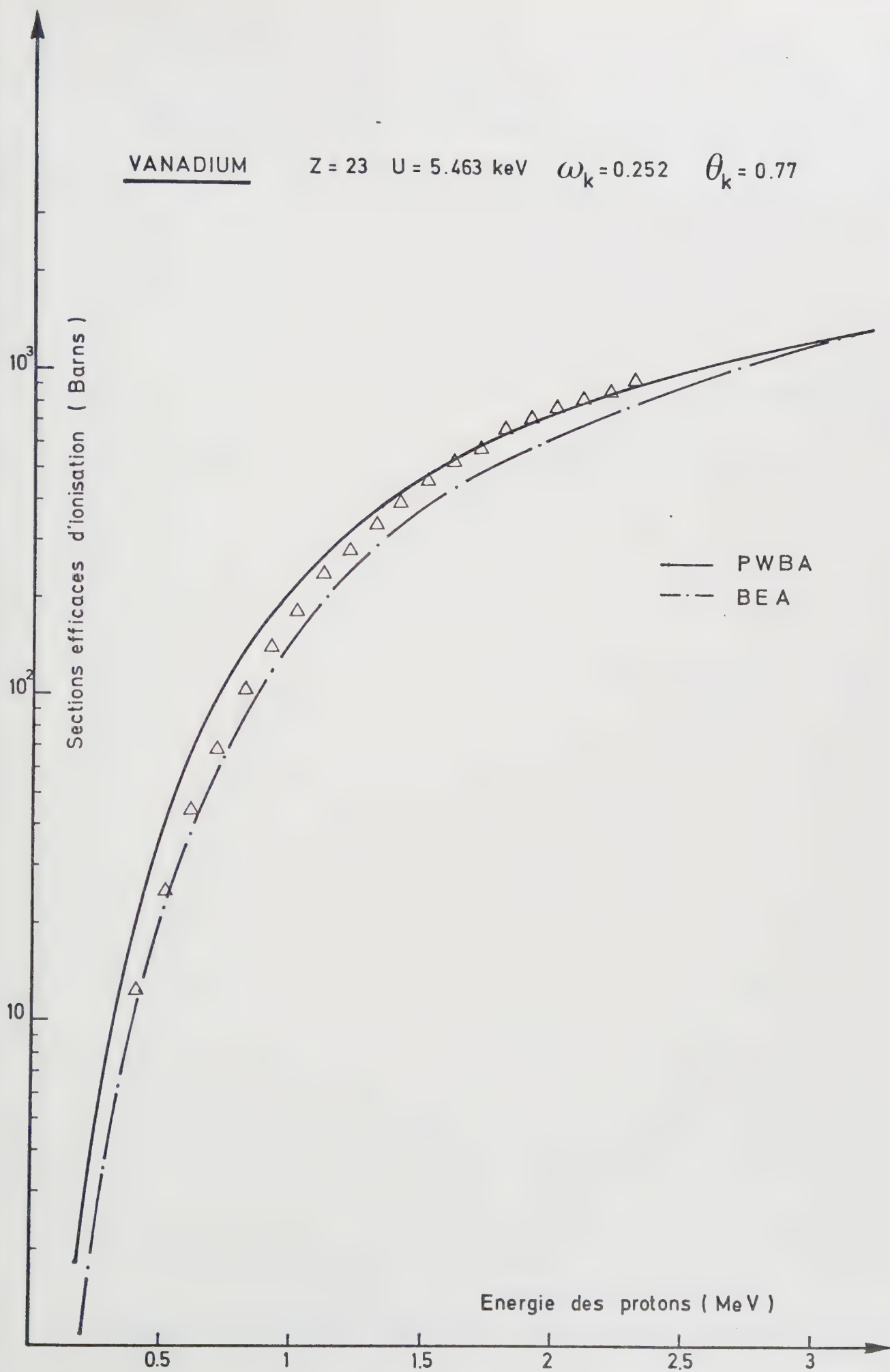


fig 13

CHROME

$Z = 24$

$U = 5.988 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.282$

$\theta_k = 0.78$

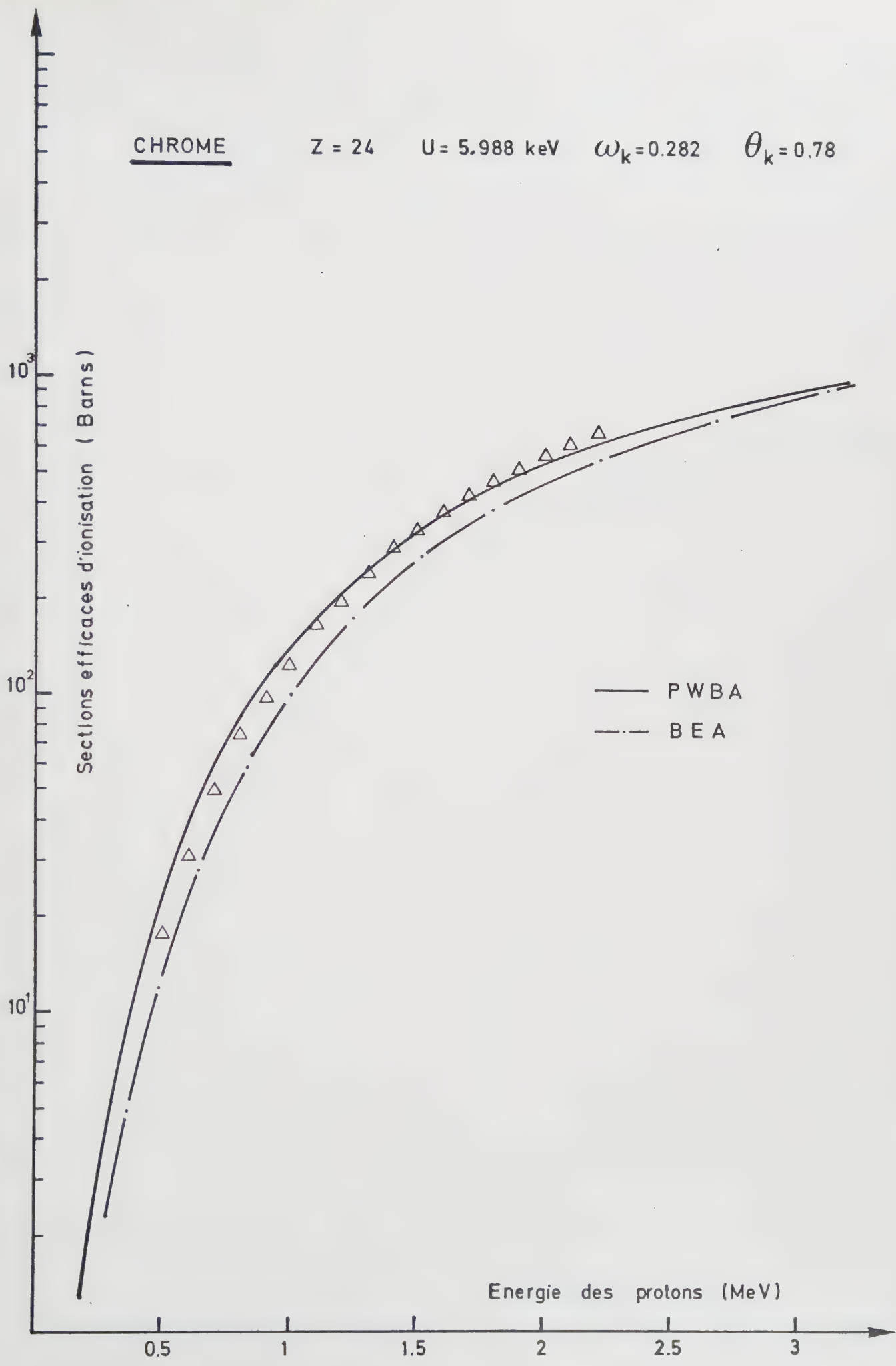


fig 14

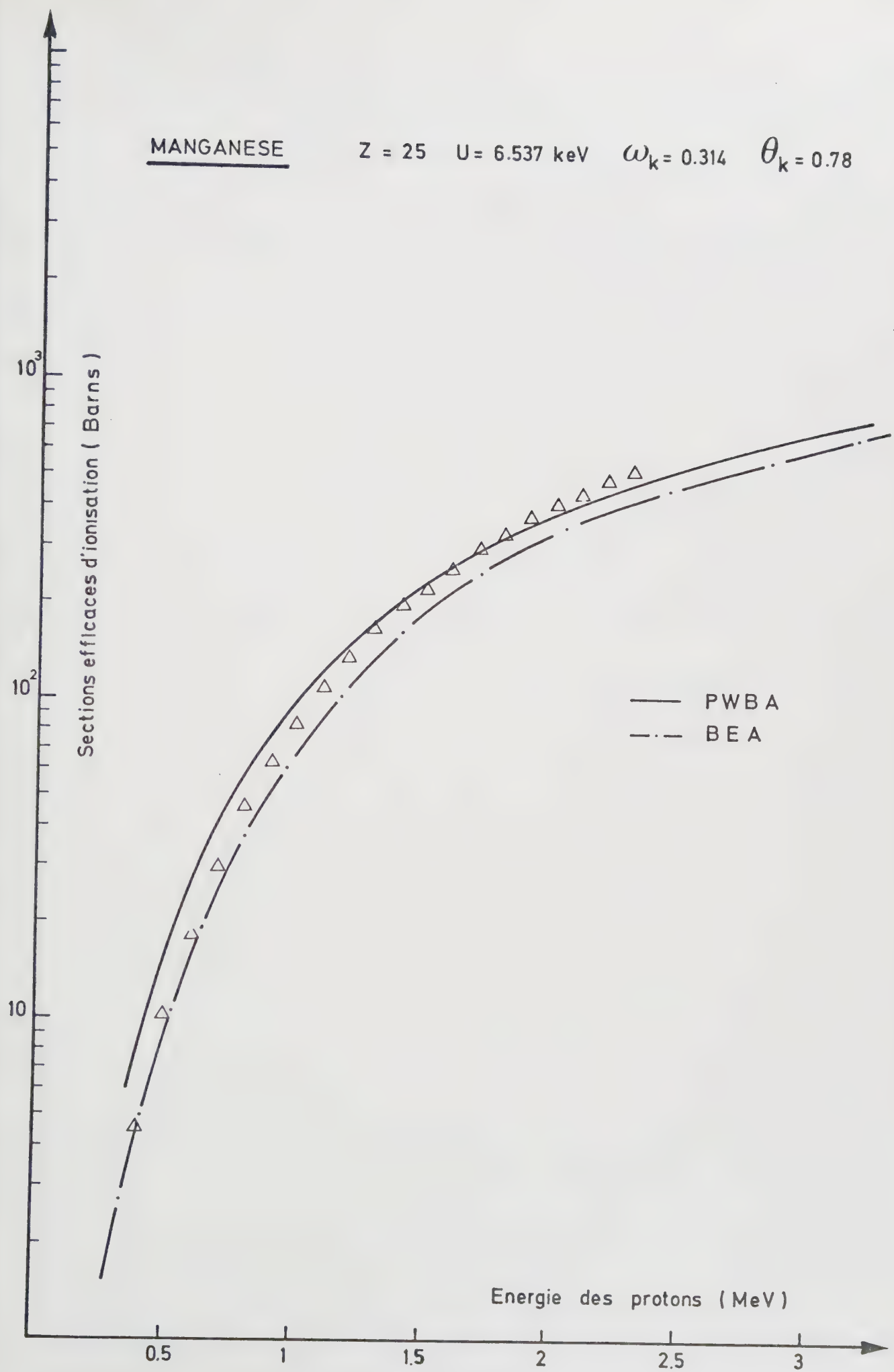


fig 15

FER

$Z = 26$

$U = 7.111 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.342$

$\theta_k = 0.78$

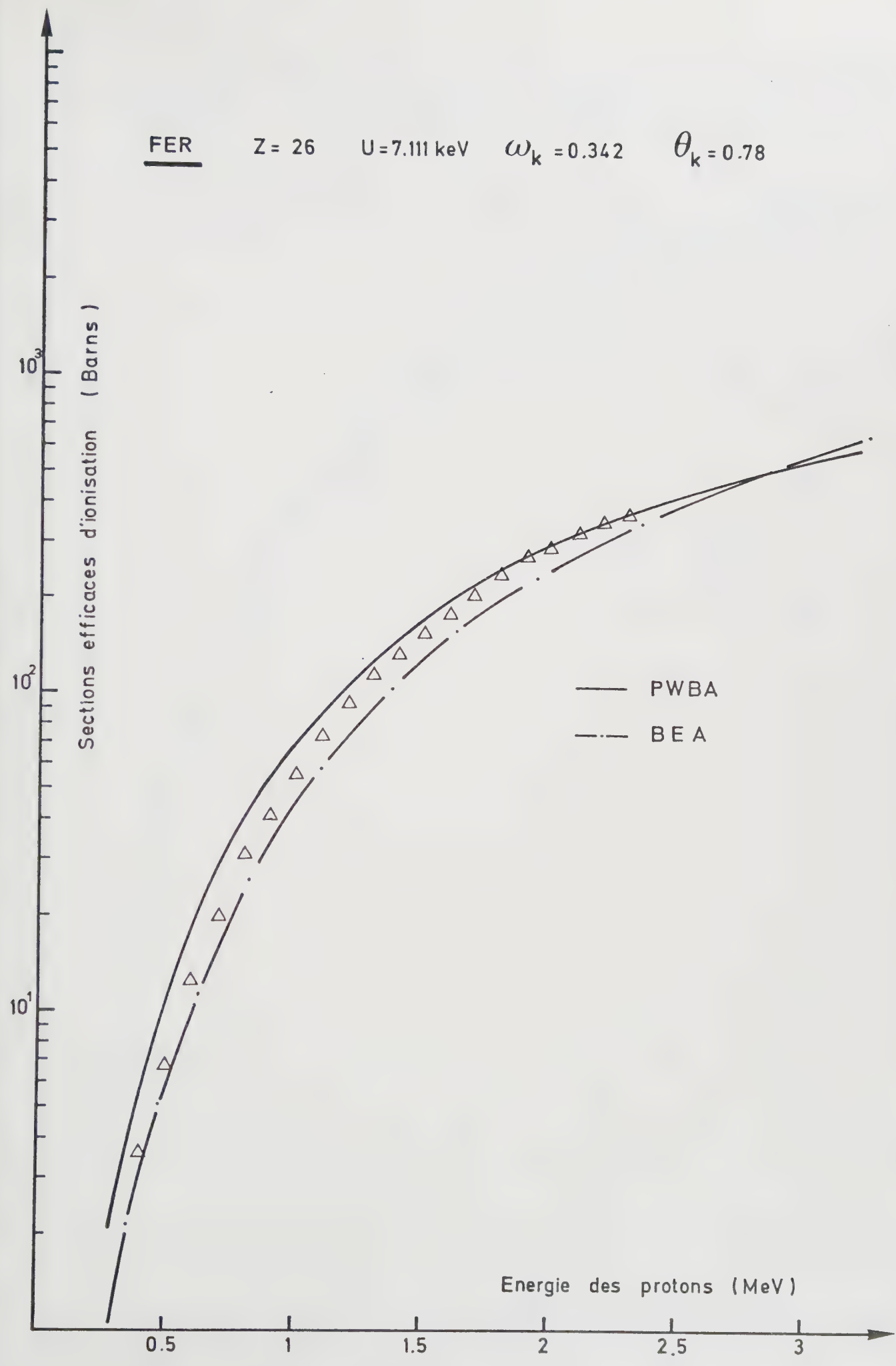


fig 16

COBALT

$Z = 27$

$U = 7.709 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.381$

$\theta_k = 0.79$

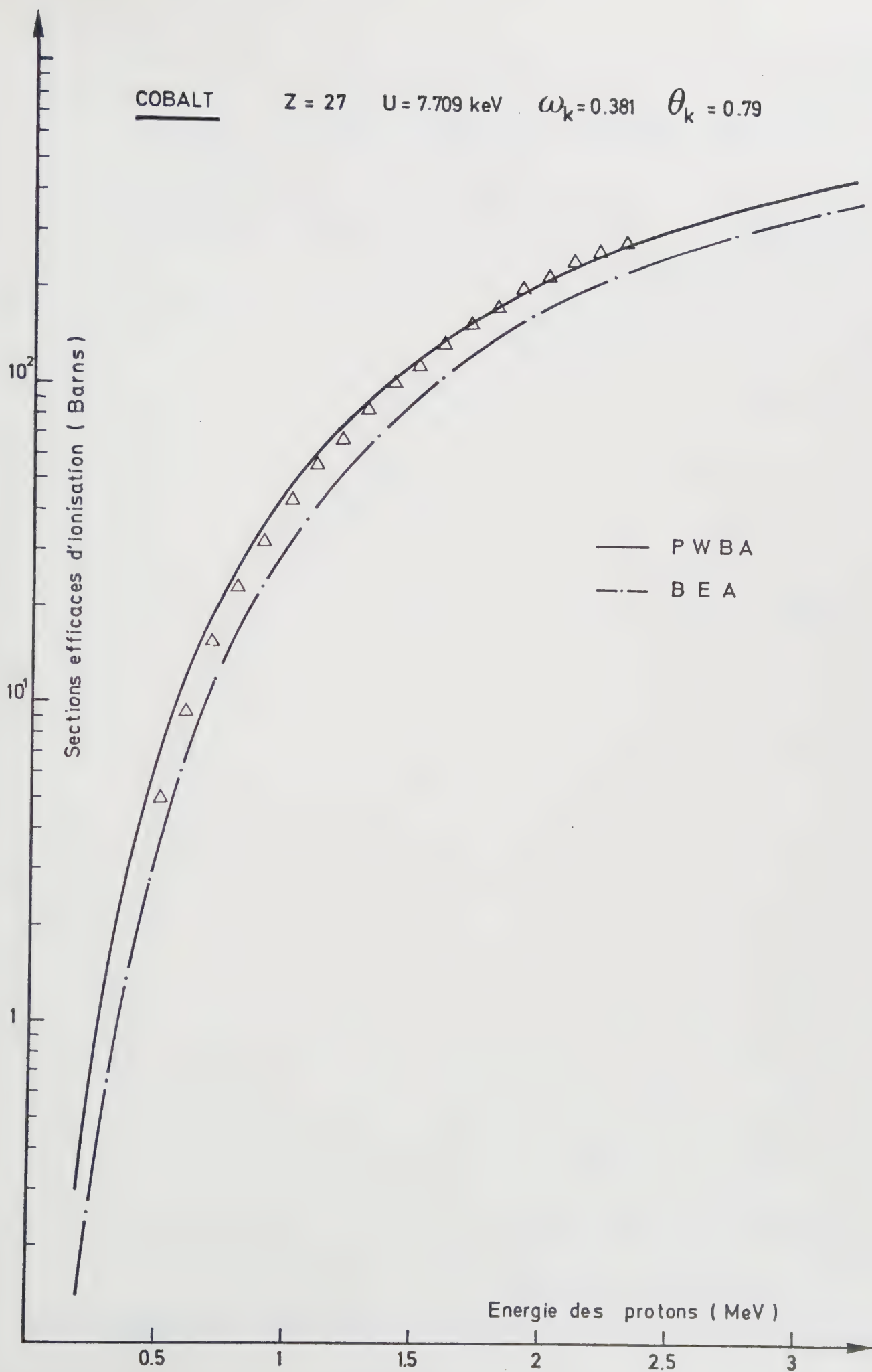


fig 17

NICKEL

$Z = 28$

$U = 8.331 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.414$

$\theta_k = 0.79$

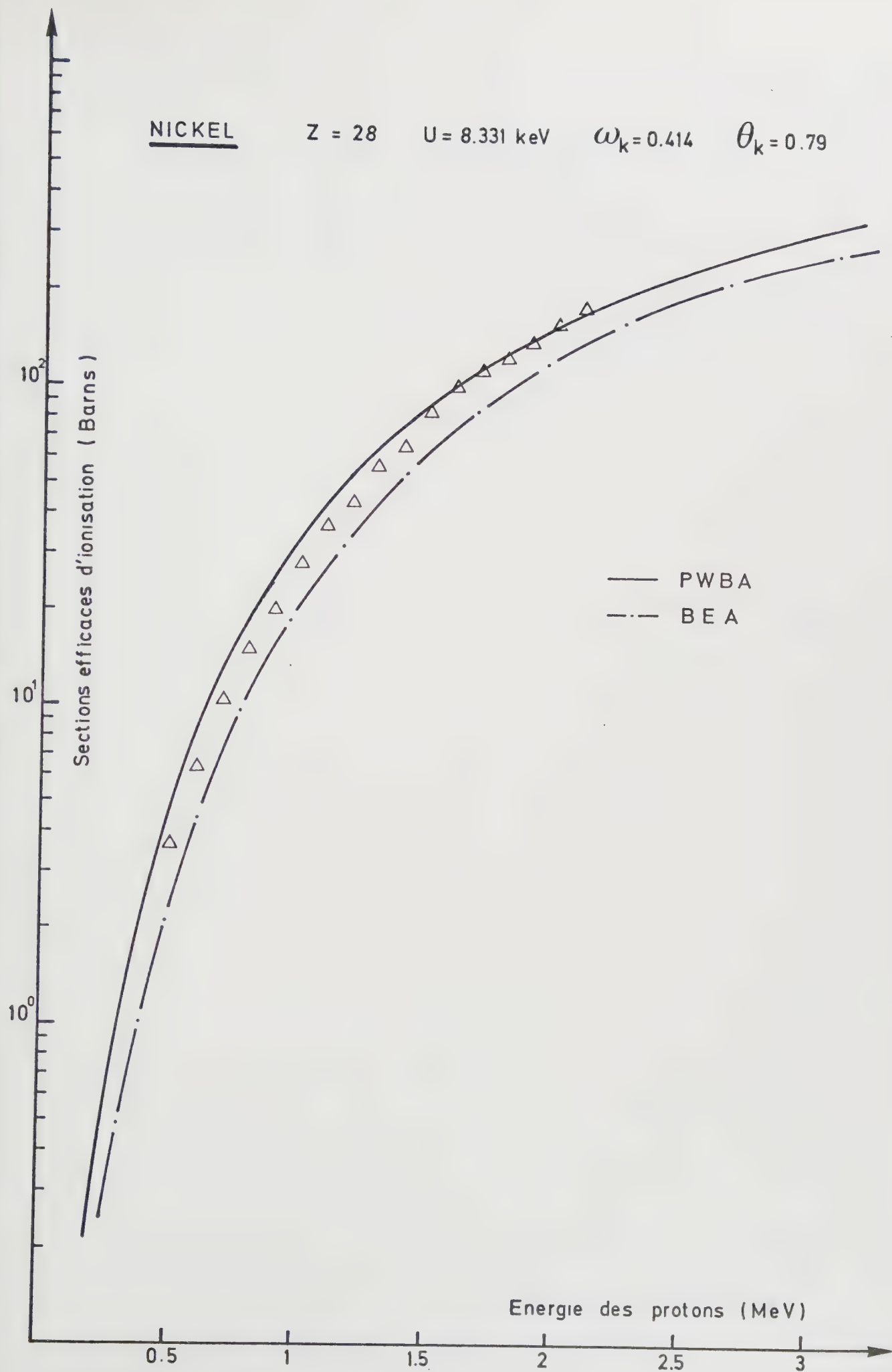


fig 18

CUIVRE

$Z = 29$

$U = 8.980 \text{ keV}$

$\omega_k = 0.444$

$\theta_k = 0.79$

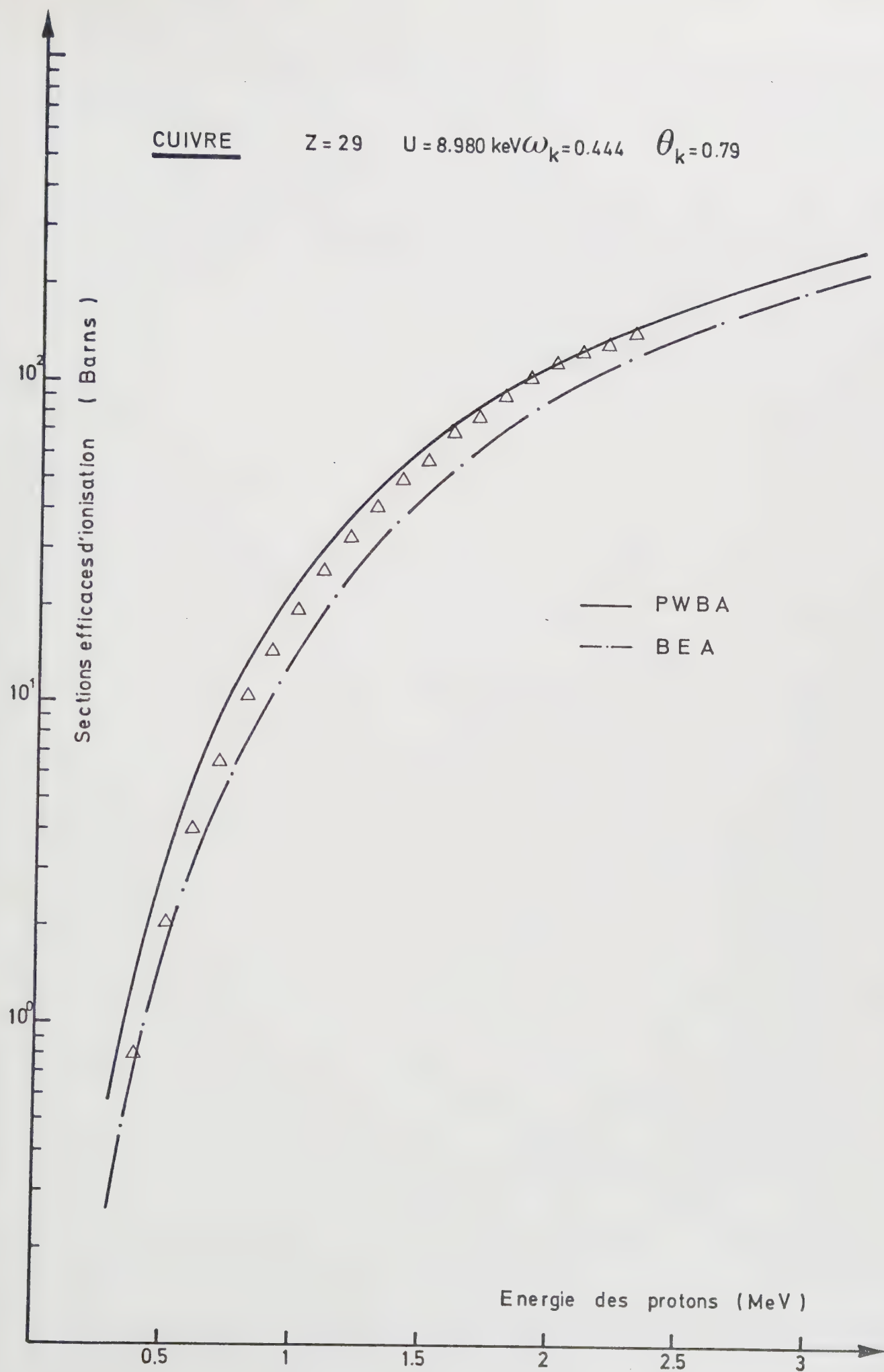


fig 19

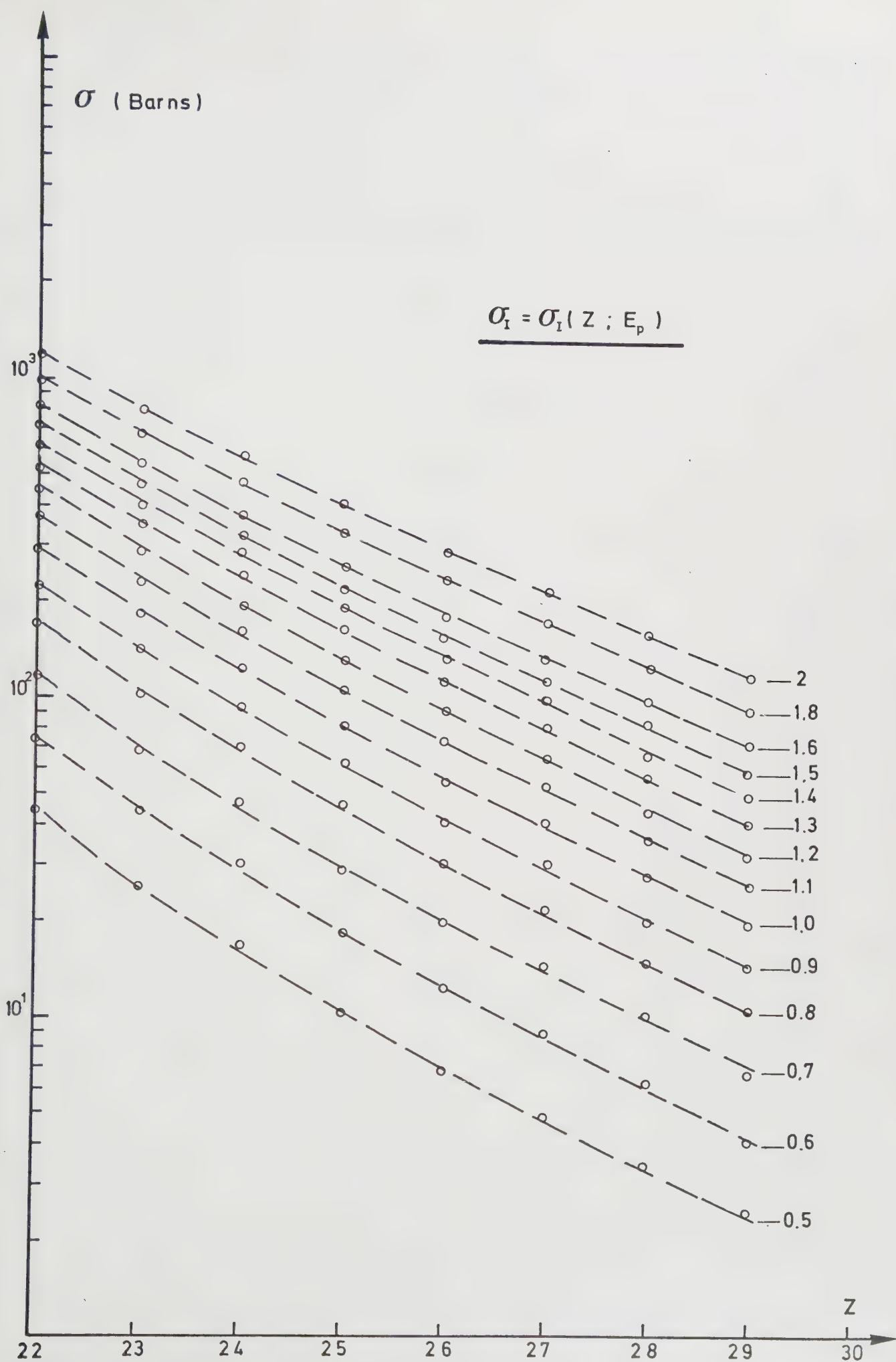


fig 20

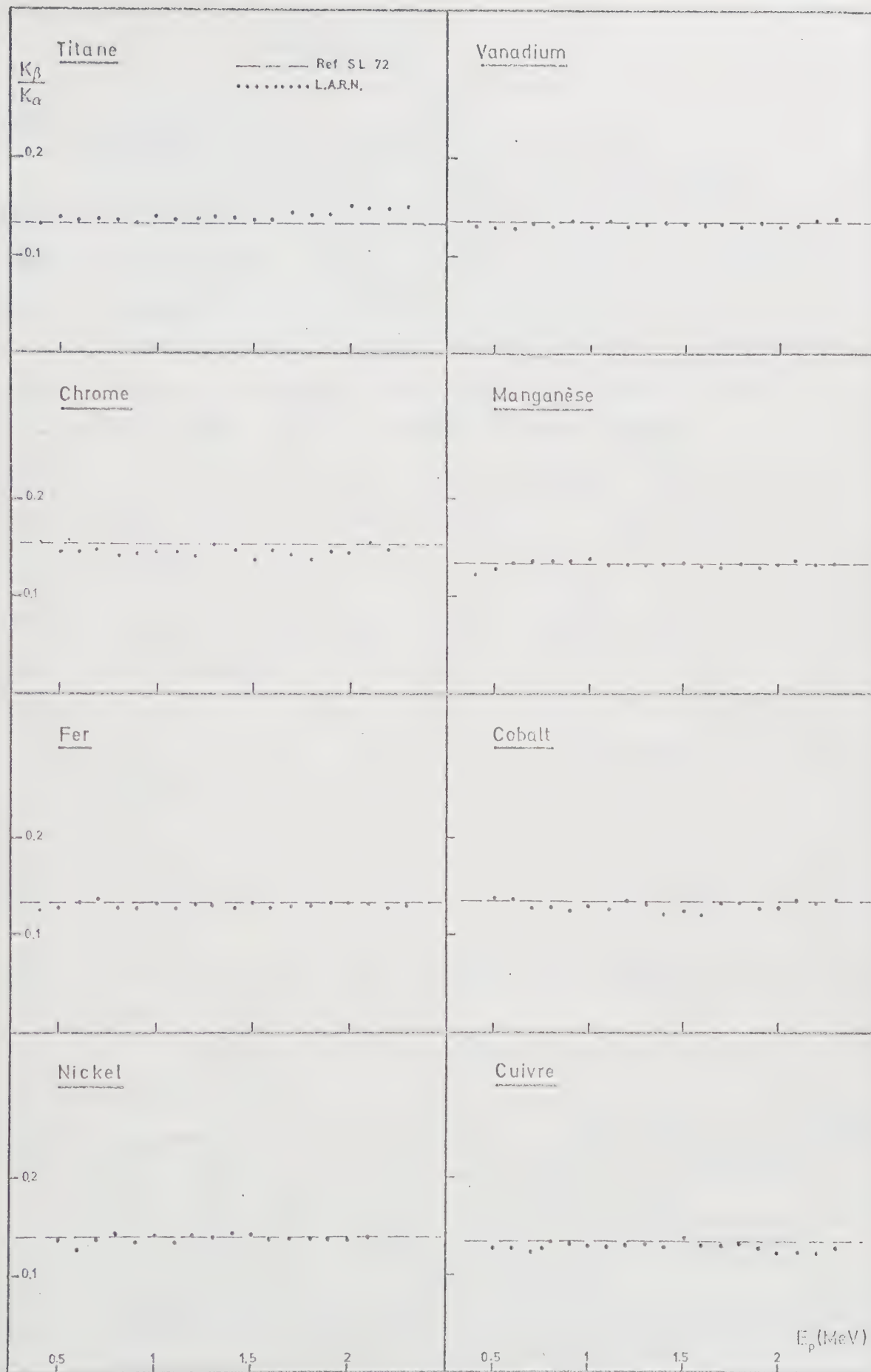


fig 21

REFERENCES

- AB68** M.ABRAMOWITZ et I.A.SEGUN
Handbook, of Mathematical Functions Ed. Dover
- BA72** W.BAMBYNEK et al. Review of Modern Physics 44 (1972) 716-813
- BE67** G.A.BEARDEEN. Review of Modern Physics 39 (1967) 78
- BO73** F.BODART, G.DECONNINCK, J.M.HONTOY, S. WILK.
Radiochemical, Radioanalytical letters. 13/3/1973.
- DW57** Tables of integrals and other mathematical data.
H.B.DWIGHT. Editor The Mac Millan Company.
- GA70** J.D.GARCIA. Physical Review A1 (1970) 280-285.
- GR65** M.GRYZINSKI. Physical Review 138 (1965) 305.
- GU66** GUERJOY. Physical Review 148 (1966) 54.
- HA56** HANNOVER. Physical Review 102 (1956) 340.
- HA60** H.L.HAGEDOORN et A.H.WAPSTRA. Nuclear Physics. 15(1960)146.
- JO51** R.JOST et A. PAIS. Physical Review 82 (1951) 840.
- KA69** G.S.KHANDELWAL, B.H.CHOI et E. MERZBACHER. Atomic Data
(1969) n°1 Ed. Academic Press.1.
- LA 53** LANDER. Physical Review 91 (1953) 1382.
- LA67** L.LANDAU et E. LIFCHITZ. Mécanique Quantique T.3(1967).
Ed. Mir.
- LA72** L.LANDAU et E.LIFCHITZ. Mécanique Quantique relativiste
Tome 4 (1972) Ed. Mir.
- LI50** B.A. LIPPMANN et J. SCHWINGER. Physical Review 79
(1950) 469.
- LI60** LIEBHAFSKY H.A. , PFEIFFER H.G., WINSLOW.E.H. et ZEMANY
P.D. " X-Ray absorption and émission in analytical
chemistry" Ed. J.Wiley & Sons N.Y. 1960.
- MA67** J.B. MARION, F.C.YOUNG. Nuclear reaction analysis,
graphs and tables Ed. North-Holland.
- ME58** E.MERZBACHER, H.W.LEWIS Encyclopedia of Physics Vol. 34,
Ed. Springer-Verlag, S.Flügge Berlin 1958.
- ME64** A.MESSIAH. Mécanique Quantique, Tome 2, Ed. Dunod(1964).

- ME68 M.A. MELKANOFF, T. SAWADA, J. RAYNAL. Methods in computational Physics, 6(1966)2.
- MO65 N.F. MOTT, H.S.W MASSEY. "The theory of atomic collisions". 3^{ème} édition (1965), Ed. Oxford.
- PE65 F.G. PEREY. Communication privée faite au Dr. J.P. Meulders de l'Université de Louvain-la-Neuve, Belgique. (Thèse 1969).
- SL72 V.W. SLIVINSKY, P.J. EBERT Physical Review A4(1972)1581.
- ST64 STABLER Physical Review 133A(1964)1268.
- TH69 B.K. THOMAS, J.D. GARCIA. Physical Review 179(1969)94.
- VR67 VRIENS. Proceedings of Physical Society 90(1967)935.
- WA56 M.C. WALSKE. Physical Review 101(1956)940.
- WA71 D.L. WALTERS, C.P. BHALLA. Atomic Data(1971) n°3 Ed. Academic Press. 301.

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 28 Mai 1973

le Président de la thèse

Lebay

VU, et permis d'imprimer,

Grenoble, le

le Président de l'Université
Scientifique et Médicale

[Signature]

